Р. ФАЙНМАН Р. ЛЕЙТОН М. СЕНДС

ФАЙНМАНОВИ ЛЕКЦИИ ПО ФИЗИКА

ТОМ 3

НАРОДНА ПРОСВЕТА

Р. Файнман, Р. Лейтон, М. Сендс

Файнманови лекции по физика

том 3



КВАНТОВА МЕХАНИКА

Превели от руски *Н. Ахабабян*
Д. Факиров

Р. ФАЙНМАН
Р. ЛЕЙТОН
М. СЕНДС

ФАЙНМАНОВИ ЛЕКЦИИ ПО ФИЗИКА

том 3

„НАРОДНА ПРОСВЕТА“, 1976 г.

Р. Фейнман, Р. Лейтон, М. Сэндс

ФЕЙМАНОВСКИЕ ЛЕКЦИИ ПО ФИЗИКЕ

ИЗДАТЕЛСТВО „МИР“
МОСКВА, 1966 Г.

Из предговора към руското издание

„Файнмановите лекции по физика“ достигат до своя край. Този трети том завършва курса и запознава читателите с идеите и задачите на съвременната квантова механика.

Квантовата механика се счита за трудна наука. И това е истина: нейните методи и понятия са все още далеч от нагледност. За да се разкаже за нея разбираемо и увлекателно, необходимо е да се съчетава талантът на педагога с големия опит на изследователя. Обикновено при изучаване на квантовата механика за бариер служи нейния математичен апарат. За да се научим да решаваме квантовомеханични задачи трябва да знаем диференциалните уравнения с частни производни, свободно да боравим със специалните функции и да умеем още много неща.

Но в действителност трудността на квантовата механика е свързана не само с математиката. Нещо повече, даже не е задължително да се започне с нея. В лекциите на Файнман изучаването на квантовата механика започва с физиката, а уравнението на Шрьодингер се появява едва към края. При това се оказва, че за много задачи—от разсейването на електроните до свръхпроводимостта—може да се разказва, без да се прибягва до изследването на сложни уравнения. Обаче това съвсем не означава, че квантовата механика е проста наука. В действителност изучаването на формули и уравнения е полезно, отколкото проследяването на физическите разсъждения и разбирането на логиката на природните явления, които често изглеждат много странно. Затова необходимо е да се употреби много време и труд, за да се постигне красотата и величието на това, което е разказано в този курс. Ако читателят с успех преодолее първия етап от дългия път, той ще бъде напълно възнаграден за своите усилия. За щастие, този път няма край. Тези, които пожелаят да продължат по-нататък трябва, разбира се, да изучат още много други неща, и преди всичко доста сложна (но също много красива) математика. Обаче и за тях това, което са научили от лекциите ще бъде добра школа: полезно е от самото начало да се научим да отделяме математичния език на науката от нейното физическо съдържание.

Квантовата механика не е изолирана наука. Тя не може да бъде разбрана без познаването на класическата физика. Затова, четейки този последен том, ще бъде полезно от време на време да се връщате към предишните. Впрочем, това което е разказано там сега ще изглежда по новому.

юли 1966 г. *Я. Смородински*



Предговор

От времето на великия триумф на физиката на XX век — създаването на квантовата механика — изминаха повече от 40 години, но и досега, четейки уводния курс по физика[1], ние се ограничаваме с някои случайни намеци за тази основна област на нашите знания за физическия свят. Считайки, че не е много хубаво да се постъпва така със студентите, в настоящия курс ние направихме опит да изложим основните, най-съществените идеи на квантовата механика, и то така, че да бъде разбираемо. Този курс беше построен по съвършено нов начин, особено като се има пред вид, че той беше предназначен за второкурсници и всичко в него в значителна степен трябва да се разглежда като експеримент. Сега, след като се изясни колко лесно се усвоява този предмет от мнозинството студенти, можем да считаме експеримента за успешен. Разбира се, тук много неща трябва да се подобрят и това ще стане с натрупването на преподавателски опит. И така сега пред вас стои отчетът на първия такъв експеримент.

В двегодишния курс „Файнманови лекции по физика", който се четеше от септември 1961 г. до май 1963 г. като уводен курс по физика в Калифорнийския технологичен институт, квантовомеханичните понятия се въвеждаха навсякъде, където това беше необходимо за разбиране на описваните явления. Освен това последните дванадесет лекции от втората година бяха посветени изцяло на по-свързаното излагане на някои понятия от квантовата механика. Но с наближаване края на лекциите ставаше ясно, че за квантовата механика сме оставили твърде малко време. Установи се, че с помощта на този вече развит елементарен подход може да се разгледат и други важни и интересни теми. Освен това съществуваше опасност, пред вид малкия опит на работа с вълновата функция на Шрьодингер, въведена в дванадесетата лекция, че студентът не ще може да се ориентира в изложението, прието в други книги, които ще му се наложи да чете. Затова бе решено курсът да се разшири с още седем лекции. Те бяха прочетени на второкурсниците през май 1964 г. Тези лекции донякъде разширяват и завършват развития в предишните лекции материал.

[1] Този курс в американските университети се приближава към курса по опитна физика в нашите университети. — (бел. бълг. ред.)

В този том още от самото начало се прави опит да се изяснят най-основните и общи черти на квантовата механика. Първите глави са посветени на представите за амплитуда на вероятността, интерференция на амплитудите, абстрактно определение за състояние, суперпозиране и разлагане на състояния, като още от самото начало се използуват означенията на Дирак. За всеки отделен случай въвеждането на нова представа се съпровожда с подробен разбор на няколко частни примера, за да получават физическите идеи възможно най-голяма реалност. След това се разглежда зависимостта на състоянието от времето, включително и състояния с определена енергия, и тези идеи незабавно се прилагат за изучаване на системи с две енергетични нива — имащи само две възможни стойности на енергията. Подробното изследване на амонячния мазер подготвя почвата за въвеждане процесите на поглъщане на светлина и индуцираните преходи. След това в лекциите се разглеждат по-сложни системи, докато се стигне до изучаване на разпространението на електрони в кристални решетки и до достатъчно пълното излагане на квантовомеханичната теория на момента на количество на движение. Въведението в квантовата механика завършва с обсъждане на свойствата на вълновата функция на Шрьодингер, неговото диференциално уравнение и решенията му за водородния атом.

Последната глава на този том не трябва да се разглежда като част от „курса". Това е „семинар по свръхпроводимост", проведен в духа на онези лекции от първите два тома, които бяха четени „за развлечение", за да помогнем на студентите да погледнат по-широко на връзката между това, което са учили с общата култура по физика. „Епилогът" на Файнман слага точка в този курс.

Както вече бе обяснено в увода към първия том, тези лекции представляват част от програмата за разработване на нов встъпителен курс, провеждан под ръководството на Комитета за ревизия на курса по физика (Робърт Лейтън, Виктор Неер, Метю Сендс). Осъществяването на тази програма стана възможно благодарение на помощта на Фордовата фондация. Техническа помощ при подготовката на този том оказаха Мерил Клейтън, Юлия Курцис, Джеймс Харт, Том Харвей, Мартин Израел, Патриция Прейс, Фани Уорън, Барбара Цимерман и много други. Проф. Джери Нойгебауер и проф. Чарлз Уитлс прочетоха внимателно ръкописа и допринесоха много за точността и яснотата на изложението.

Но самата повест за квантовата механика, която вие ще намерите тук, принадлежи на Ричард Файнман. Нашият труд не ще е бил напразен, ако сме успели да ви предадем поне част от възторга, който ние самите изпитвахме, проследявайки как в неговите пълни с жизненост лекции се разкриваха все нови и нови идеи.

декември 1964 г. *Метю Сендс*

Съдържание:

Предговор 6

1. Амплитуди на вероятността

1-1. Закони за образуване на амплитудите 10
1-2. Картина на интерференция от два отвора 14
1-3. Разсейване от кристал 17
1-4. Тъждествени частици 19

2. Тъждествени частици

2-1. Бозе-частици и ферми-частици 23
2-2. Състояния с две бозе-частици 25
2-3. Състояния с n бозе-частици 28
2-4. Излъчване и поглъщане на фотони 29
2-5. Спектър на абсолютно черното тяло 31
2-6. Течен хелий 34
2-7. Принцип за забрана 35

3. Спин единица

3-1. Филтриране на атоми с помощта на прибора на Щерн—Герлах 39
3-2. Опити с филтрирани атоми 43
3-3. Последователно съединяване на филтри на Щерн—Герлах 45
3-4. Базисни състояния 46
3-5. Интерфериращи амплитуди 48
3-6. Механика на квантовата механика 51
3-7. Трансформация към друг базис 54
3-8. Други случаи 56

4. Спин една втора

4-1. Трансформация на амплитудите 57
4-2. Трансформация при преминаване към завъртяна координатна система 59
4-3. Въртения около оста z 62
4-4. Въртения на 180° и на 90° около оста y 65
4-5. Въртения около оста x 68
4-6. Произволни въртения 69

5. Зависимост на амплитудите от времето

5-1. Атоми в покой; стационарни състояния 72
5-2. Равномерно движение 75
5-3. Потенциална енергия; запазване на енергията 77
5-4. Сили; класическо приближение 80
5-5. „Прецесия“ на частици със спин $^1/_2$ 82

6. Хамилтонова матрица

6-1. Амплитуди и вектори 86
6-2. Разлагане на векторите на състояния 88
6-3. Какви са базисните състояния на света? 90
6-4. Как се изменят състоянията с времето? 93
6-5. Хамилтонова матрица 96
6-6. Молекула на амоняка 97

7. Амонячен мазер

7-1. Състояния на амонячната молекула 102
7-2. Молекулата на амоняка в статично електрично поле 106
7-3. Преходи в поле, зависещо от времето 110
7-4. Резонансни преходи 113
7-5. Нерезонансни преходи 114
7-6. Поглъщане на светлина 116

8. Други системи с две състояния

8-1. Йон на водородната молекула 118
8-2. Ядрени сили 123
8-3. Водородна молекула 126
8-4. Молекула на бензола 128
8-5. Багрила 130
8-6. Хамилтониан на частица със спин $^1/_2$ в магнитно поле 131
8-7. Въртящ се електрон в магнитно поле 133

9. Още системи с две състояния

9-1. Спинови матрици на Паули 137
9-2. Спиновите матрици като оператори 141
9-3. Решение на уравнението за две състояния 144
9-4. Състояния на поляризация на фотона 146
9-5. Неутрален K-мезон 149
9-6. Обобщение за система с N състояния 158

10. Свръхфино разцепване във водорода

10-1. Базисни състояния за системи от две частици със спин $^1/_2$ 162
10-2. Хамилтониан на основното състояние на водородния атом 164
10-3. Енергетични нива 169
10-4. Зееманово разцепване 171
10-5. Състояния в магнитно поле 174
10-6. Проекционна матрица за спин 1 176

11. Разпространение в кристална решетка

11-1. Състояние на електрона в едномерна решетка 180
11-2. Състояния с определена енергия 183
11-3. Състояния, зависещи от времето 186
11-4. Електрон в тримерна решетка 187
11-5. Други състояния в решетката 189
11-6. Разсейване от нерегулярности в решетката 190
11-7. Захват от нерегулярности в решетката 193
11-8. Амплитуди на разсейване и свързани състояния 193

12. Полупроводници

12-1. Електрони и дупки в полупроводниците 195
12-2. Примесни полупроводници 198
12-3. Ефект на Хол 202
12-4. p—n-преходи между полупроводниците 203
12-5. Изправяне от p—n-прехода между два полупроводника 206
12-6. Транзистор 207

13. Приближение на независимите частици

13-1. Спинови вълни 209
13-2. Две спинови вълни 213
13-3. Независими частици 215
13-4. Молекула на бензола 216
13-5. Още малко органична химия 220
13-6. Други приложения на приближението 223

14. Зависимост на амплитудата от мястото

14-1. Изменение на амплитудата по дължината на права 225
14-2. Вълнова функция 229
14-3. Състояние с определен импулс 232

14-4. Нормировка на състоянията с определена координата x 234
14-5. Уравнение на Шрьодингер 237
14-6. Квантуване на енергетичните нива 240

15. Симетрия и закони за запазване

15-1. Симетрия 243
15-2. Симетрия и нейното запазване 246
15-3. Закони за запазване 250
15-4. Поляризирана светлина 253
15-5. Разпад на Λ^0 255
15-6. Резюме на матриците на въртене 259

16. Момент на количеството на движение

16-1. Електрично диполно излъчване 261
16-2. Разсейване на светлина 263
16-3. Анихилация на позитрония 265
16-4. Матрица на въртене за произволен спин 270
16-5. Измерване на ядрения спин 275
16-6. Събиране на моментите на количеството на движение 276
Приложение 1. Извод на матриците на въртене 284
Приложение 2. Запазване на четността при излъчване на фотона 286

17. Атом на водорода и периодична таблица

17-1. Уравнение на Шрьодингер за водородния атом 288
17-2. Решения със сферична симетрия 289
17-3. Състояния с ъглова зависимост 293
17-4. Общо решение за водорода 298
17-5. Вълнови функции на водорода 300
17-6. Периодична таблица 302

18. Оператори

18-1. Операции и оператори 308
18-2. Средни енергии 311
18-3. Средна енергия на атома 314
18-4. Оператор на мястото 316
18-5. Оператор на импулса 317
18-6. Момент на количеството на движение 322
18-7. Изменение на средните с времето 324

19. Уравнение на Шрьодингер в класически контекст. Семинар по свръхпроводимост

19-1. Уравнение на Шрьодингер в магнитно поле 327
19-2. Уравнение на непрекъснатост за вероятностите 329
19-3. Два рода импулси 331
19-4. Смисъл на вълновата функция 332
19-5. Свръхпроводимост 334
19-6. Явление на Майснер 335
19-7. Квантуване на потока 337
19-8. Динамика на свръхпроводимостта 340
19-9. Преходи на Джозефсън 342

Епилог 347

1

Амплитуди на вероятността

1-1. Закони за образуване на амплитудите

1-2. Картина на интерференцията от два отвора

1-3. Разсейване от кристал

1-4. Тъждествени частици

1-1. Закони за образуване на амплитудите

Когато Шрьодингер откри правилните закони на квантовата механика, той написа уравнение, което описва амплитудите на вероятността за намиране на дадена частица в различни места. Това уравнение прилича на много други уравнения, които бяха вече известни в класическата физика. Там с тяхна помощ се описва движението на въздуха в звуковата вълна, разпространението на светлината и др. Така че в началния период на развитие на квантовата механика голяма част от времето учените се занимаваха с решаването на това уравнение. Но в същото време започна (в частност благодарение на работите на Борн и Дирак) осмислянето на онези фундаментално нови идеи, които лежат в основата на квантовата механика. В процеса на по-нататъшното развитие се изясни, че тя съдържа много повече от това, което дава уравнението на Шрьодингер — например спина на електрона, различни релативистични ефекти и др. По традиция всички курсове по квантова механика започват по същия начин, повтаряйки пътя, изминат в хода на историческото развитие на предмета. Отначало дълго изучават класическата механика, за да може след това да се разбере как се решава уравнението на Шрьодингер. После също толкова дълго се получават различни решения. И само след детайлно изучаване на това уравнение се преминава към такива „висши“ въпроси, като тези за спина на електрона и др.

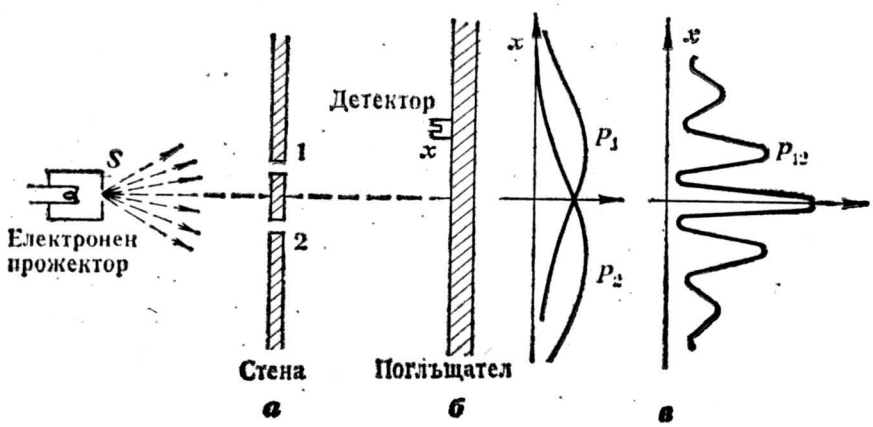
Отначало ние също считахме, че най-добре ще бъде да завършим тези лекции, показвайки как се решават уравненията на класическата физика за различни сложни случаи, такива като описване на звуковите вълни в затворен обем, видове електромагнитни лъчения в цилиндрични кухини и т. н. Такъв беше първоначалният план на този курс, но след това решихме да се откажем от този план и вместо него да дадем известен увод в квантовата механика. Ние стигнахме до заключението, че това, което обикновено наричат „висши“ раздели на квантовата механика, в действителност са съвсем прости неща. Необходимата за това математика е съвсем елементарна — използват се само прости алгебрични операции, не са нужни никакви диференциални уравнения (или в краен случай ще трябват само най-простите). Проблемът се състои само в това да се прескочи само едно препятствие: да се усвои, че нямаме повече право *детайлно* да описваме поведението на частиците в пространството. Ето с това искаме да започнем: да разкажем за това, което обикновено наричат „висши“ раздели на квантовата механика. Но уверявам ви, че това са най-простите (в пълния смисъл на тази дума), но същевременно и най-основните нейни части. Откровено казано, ние правим педагогически експеримент и доколкото ни е известно, досега такъв не е бил провеждан.

Разбира се, такъв подход има своя трудност: квантовомеханичното поведение е извънредно странно нещо. Никой не може да се надява, че ежедневният му опит ще му даде интуитивна, груба представа за онова, което трябва да се случи в микросвета. Квантовата механика може да се представи по два начина: възможно е доста грубо описание на протичащите процеси, като се съобщи повече или по-малко подробно какво ще се случи, но без да се формулират точните закони; или да се изложат точните закони в техния абстрактен вид. Но тогава тази абстракция ще

доведе до това, че вие няма да знаете за каква физическа реалност се отнасят те. Този начин не е удобен, понеже е съвършено отвлечен, но от първия посочен начин на изложение винаги остава едно неприятно чувство на неудовлетвореност, защото тогава никога не е известно кое е точно и кое не. И ние не знаем как да преодолеем това затруднение. С този проблем вече се срещахме по-рано (гл. 37 и 38, т. I). В гл. 37 изложението е относително строго, а в гл. 38 е дадено само грубо описание на различни явления. Сега ще се опитаме да намерим златната среда.

Ще започнем тази глава с някои общи квантовомеханични представи. Едни от тях ще бъдат съвършено точни, други ще бъдат точни частично. В хода на изложението ще бъде трудно винаги да отбелязваме за всяка от тях колко е точна, накрая когато дочетете книгата вие сами ще разбирате, обръщайки се назад, какво е било точно и какво се е оказало грубо приближение. Следващите глави няма да бъдат така неточни. Една от причините, поради която се стремим към максимална точност на изложението в тези глави, е, че така ще можем да покажем едно от най-прекрасните свойства на квантовата механика — колко много може да се извлече от нея при толкова малко предпоставки.

Ще започнем отново с изясняване на свойството за суперпозиция, наслагване на *амплитудите на вероятностите*. За пример ще вземем опита, описан в гл. 37 (т. 1) и показан още веднаж на фиг. 1.1. Имаме източник на частици s, например електрони; по-нататък стои преграда, която има два отвора, а зад преградата в точката x е поставен детектор. Ние питаме: каква е вероятността в точката x да бъде намерена частица?



Фиг. 1.1. Интерференционен опит с електрони

Първият общ принцип на квантовата механика гласи, че вероятността частицата да достигне в точката x, излизайки от s, може да бъде числено представена с квадрата на модула на комплексно число, наречено *амплитуда на вероятността*, в нашия случай — „амплитуда за това, частицата от s да попадне в x". С такива амплитуди ще се занимаваме много, поради което е удобно да се използува съкратено означение, изобретено от Дирак и получило всеобщо приложение в квантовата механика за означаване на това понятие. Да запишем амплитудата на вероятността така:

$$<\text{частицата попада в } x|\ \text{частицата напуска } s>. \qquad (1.1)$$

С други думи, двете скобки $<\ >$ заместват израза „амплитудата на вероятността за това, че", изразът *вдясно* от вертикалната чертичка винаги задава *началното* условие, а изразът отляво — *крайното* условие. Понякога ще бъде удобно още по голямо съкращение, описвайки началното и крайното условие с по една буква. Например амплитудата (1.1) може да се запише така:

$$< x \mid s >. \qquad (1.2)$$

Трябва да се подчертае, че такава амплитуда е разбира се само едно *комплексно число*.

В гл. 37 (т. I) вече видяхме, че когато частицата може да достигне детектора по два различни пътя, резултантната вероятност не е сума от двете вероятности, а трябва да се запише като квадрат от модула на сумата от двете амплитуди. Видяхме, че вероятността електронът да достигне детектора при два открити отвора е:

$$P_{12}=|\varphi_1+\varphi_2|^2. \tag{1.3}$$

Сега ще запишем този резултат с нашите нови означения. Отначало нека формулираме *втория общ принцип* на квантовата механика. Когато частицата може да достигне дадено състояние по два различни пътя, пълната амплитуда на процеса е *сумата на амплитудите* за тези два пътя, разглеждани поотделно. С новите означения можем да запишем:

$$<x|s>_{\substack{\text{двата отвора}\\\text{открити}}}=<x|s>_{\text{през 1}}+<x|s>_{\text{през 2}}. \tag{1.4}$$

При това предполагаме, че отворите 1 и 2 са достатъчно малки, така че, когато говорим за преминаване на електрона през даден отвор, не става въпрос през коя негова част преминава. Разбира се, отворът може да се раздели на малки участъци с крайни амплитуди за това, че електронът е преминал през върха на отвора или през ниската му част и т. н. Ще допуснем, че отворите са достатъчно малки, за да не мислим повече за тази подробност. Това е една от споменатите неточности, тя може да се уточни, но засега няма да се занимаваме с това.

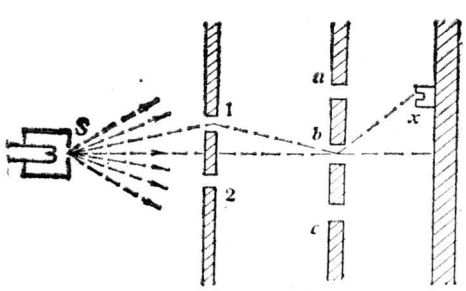
Сега искаме подробно да разгледаме амплитудата на процеса при който електронът достига точката x през отвора 1. Това може да се направи, като приложим *третия общ принцип*. Когато частицата се движи по определен път, амплитудата за този път може да се запише *като произведение на амплитудите* за преминаване на различните участъци от пътя. За опитната постановка, показана на фиг. 1.1, амплитудата за прехода от s към x през отвора 1 е равна на амплитудата за прехода от s до 1, умножена по амплитудата за преход от 1 до x.

$$<x|s>_{\text{през 1}}=<x|1><1|s>. \tag{1.5}$$

И сега това твърдение не е съвсем точно. Трябва да се добави още един множител — амплитудата на вероятността електронът да премине през отвора 1; но засега за нас съществува само един отвор и можем да положим споменатия множител равен на единица.

Забележете, че уравнението (1.5) изглежда написано в обратен ред. То трябва да се чете от дясно на ляво: електронът преминава от s до 1 и след това от 1 до x. В резултат, ако събитията се извършват едно след друго, т. е. ако имаме възможност да проследим един от пътищата на частицата и да кажем, че тя отначало прави нещо, а след това — друго, резултантната амплитуда за целия път ще се изчисли с последователните умножения на амплитудите за всички отделни събития. Използувайки този закон, можем да запишем уравнение (1.4) така:

$$<x|s>_{\substack{\text{двата отвора}\\\text{открити}}}=<x|1><1|s>+<x|2><2|s>.$$



Фиг. 1.2. По-сложен интерференционен опит

А сега ще покажем, как, използувайки само тези принципи, можем вече да решаваме и по-сложни задачи, например подобна на показаната на фиг. 1.2. В тази постановка имаме две прегради: едната с два отвора 1 и 2, а другата с три — a, b и c. След втората преграда в точката x е поставен детектор и нас ни интересува амплитудата на вероятността частицата да достигне точката x. Единият начин за решаване на тази задача се състои в пресмятането на суперпозициите, или интерференциите, на преминаващите през отворите вълни. Но може да се постъпи и по друг начин: като се вземат пред вид шестте възможни пъти-

ща на електрона до детектора и се сумират техните амплитуди. Електронът може да премине през отвора 1, след това през отвора a и да попадне в x; или след отвора 1 да премине в b и достигне до x и т. н. Според нашия втори принцип амплитудите на взаимноизключващите се пътища се сумират, така че амплитудата на прехода от s към x може да се запише като сума от шест отделни амплитуди. От друга страна, според третия принцип всяка от тях може да се запише като произведение на три амплитуди. Например една от тях е амплитудата на прехода от s към 1, умножена с амплитудата на прехода 1 към a и с амплитудата на прехода от a към x. Пълната амплитуда на прехода от s към x чрез нашите съкратени означения може да се запише във вида:

$$<x|s>=<x|a><a|1><1|s>+<x|b><b|1><1|s>+\ldots+$$
$$+<x|c><c|2><2|s>,$$

което ще запишем още по-съкратено:

$$<x|s>=\sum_{\substack{i=1,2\\ \alpha=a,b,c}}<x|\alpha><\alpha|i><i|s>. \qquad (1.6)$$

Естествено, за да използуваме този метод и проведем някакви изчисления, необходимо е да знаем амплитудите на преходи от едно място на друго. Ще ви приведа пример за една такава типична амплитуда. При нея не са отчетени някои подробности, като поляризация на светлината или спин на електрона, но всичко останало е абсолютно точно. С нейна помощ вие можете да решавате задачи, в които влизат различни комбинации от отвори. Да предположим, че частица с определена енергия преминава от положение $\mathbf{r}_1$ в положение $\mathbf{r}_2$. С други думи, тя е свободна частица: не й действуват никакви сили. Изпускайки числения множител отпред, амплитудата на преход от $\mathbf{r}_1$ към $\mathbf{r}_2$ ще се запише във вида

$$<\mathbf{r}_2|\mathbf{r}_1>=\frac{e^{i\,\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}_{12}/\hbar}}{|\mathbf{r}_{12}|}, \qquad (1.7)$$

където $\mathbf{r}_{12}=\mathbf{r}_2-\mathbf{r}_1$, а $\mathbf{p}$ е импулсът на частицата. Връзката на $\mathbf{p}$ с енергията E на частицата се определя от релативистичното уравнение

$$p^2c^2=E^2-(m_0c^2)^2$$

или от нерелативистичното уравнение

$$\frac{p^2}{2m}=\text{кинетичната енергия}.$$

Уравнение (1.7) показва, че частицата притежава вълнови свойства, че амплитудата се разпространява като вълна с вълново число, равно на импулса, делен на $\hbar$.

В общия случай в амплитудата на вероятността участвува също и времето. В повечето наши първоначални разсъждения ще се предполага, че източникът излъчва частици с дадена енергия непрекъснато, така че не е необходимо да мислим за времето. Впрочем ние имаме право да се заинтересуваме и от други въпроси. Да допуснем, че частицата се излъчва от дадено място P и в даден момент t_1 и ние искаме да знаем амплитудата за това тя да се окаже на друго място $\mathbf{r}$ в друг момент t_2. Символично това може да се представи като амплитудата $<\mathbf{r}, t_2|P, t_1>$. Ясно е, че тази амплитуда зависи както от $\mathbf{r}$, така и от t. Поставяйки детектора в различни места и извършвайки измервания в различни моменти, вие ще получавате различни резултати. Тази функция на $\mathbf{r}$ и t, най-общо казано, удовлетворява диференциално уравнение, което се оказва вълновото уравнение. Например в нерелативистичния случай това е уравнението на Шрьодингер. Полученото уравнение е аналогично на уравнението, описващо

електромагнитните вълни, или звуковите вълни в газова среда. Обаче трябва да се подчертае, че вълновата функция, удовлетворяваща уравнението на Шрьодингер, не описва реална вълна в пространството: с тази вълна не трябва да се свързват никакви физически реалности, както това се прави например при звуковите вълни.

Въпреки че когато разглеждаме една частица, можем да се опитаме да опишем процеса на езика на „корпускулярните вълни", с това няма да допринесем много за изясняването на проблема. Например, ако частиците са две, амплитудата да се открие едната от тях в точката $\mathbf{r}_1$, а другата в точката $\mathbf{r}_2$ не е обикновена в тримерното пространство, а зависи от *шест* пространствени променливи $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$. Когато частиците са две (или повече), става необходимо въвеждането на следния добавъчен принцип. Ако двете частици не взаимодействуват, амплитудата едната частица да извърши нещо, а другата — нещо друго, представлява произведение на двете амплитуди за процесите, в които биха участвували двете частици поотделно. Например, ако $\langle a \mid s_1 \rangle$ е амплитудата за това, частицата 1 да премине от s_1 в a, а $\langle b \mid s_2 \rangle$ — амплитудата за прехода на частицата 2 от s_2 в b, амплитудата на вероятността тези две събития да се извършат едновременно ще бъде:

$$\langle a \mid s_1 \rangle \langle b \mid s_2 \rangle.$$

Да подчертаем още нещо. Нека предположим, че не ни е известно откъде се появяват частиците на фиг. 1.2, преди да са преминали през отворите на първата преграда. Независимо от това ние можем да предскажем какво ще стане след преградата (например да изчислим амплитудата за попадане в x) само ако са дадени две числа: амплитудата за попадане в 1 и амплитудата за попадане в 2. С други думи, поради това че амплитудите за последователните събития се умножават, както това се вижда и от формула (1.6), всичко, което ни е необходимо за продължаване на анализа са две числа — в дадения случай $\langle 1 \mid s \rangle$ и $\langle 2 \mid s \rangle$. Тези две комплексни числа са достатъчни, за да предскажем цялото бъдеще за процеса. Ето това е, което прави квантовата механика проста. В следващите глави ще видите, че именно това и правим, когато отбелязваме началните условия с помощта на две (или няколко) числа. Разбира се, тези числа зависят от това, къде е разположен източникът и какви са другите свойства на прибора, но стига тези числа да са дадени, повече подробности не са ни необходими.

1-2. Картина на интерференция от два отвора

Да разгледаме още веднаж въпроса, който вече доста подробно обсъждахме в гл. 37 (т. I). Сега ще използуваме идеята за амплитудите в пълната ѝ сила, за да видим как работи тя. Да се върнем към опита, показан на фиг. 1.1, и да добавим към тази постановка един източник на светлина, поставен зад преградата. В гл. 37 достигнахме до следния забележителен резултат. Ако следим отвора 1 и отбелязваме фотоните, разсейващи се зад него, разпределението на вероятността за попадане на електрони в x при едновременното наблюдаване на тези фотони е точно такова, каквото би било, ако отворът 2 е закрит. Сумарното разпределение на електроните, които са „отбелязани" на отвора 1 или на отвора 2, е сума от отделните разпределения и съвсем не прилича на разпределението, което се получава, когато светлината е изключена. Поне така се получава, когато използуваната светлина е с малка дължина на вълната. Когато дължината на вълната започва да расте, увереността в кой от отворите е станало разсейването намалява и разпределението започва да прилича на това, което имаме при изключена светлина.

Да разгледаме сега този опит, използувайки принципите за образуване на амплитудите и новите означения. За да опростим

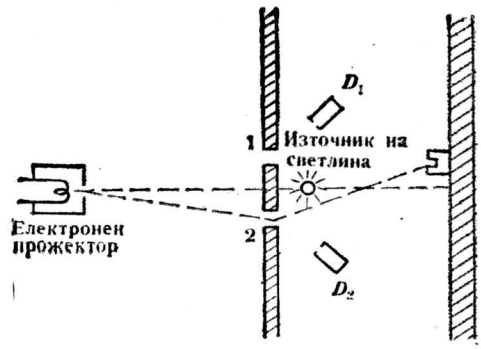
записването, можем с φ_1 да означим амплитудата за това електронът да попадне в x през отвора 1, т. е.

$$\varphi_1 = \langle x \mid 1 \rangle \langle 1 \mid s \rangle.$$

По аналогичен начин φ_2 ще означава амплитудата електронът да достигне детектора през отвора 2:

$$\varphi_2 = \langle x \mid 2 \rangle \langle 2 \mid s \rangle.$$

Това са амплитудите на вероятността електроните да преминат през отворите и достигнат точката x, когато няма светлинен източник. Когато той е включен, ние искаме да знаем: каква е амплитудата за процеса, при който отначало електронът се излъчва от източника s, а фотонът — от светлинния източник L, а в крайното състояние електронът е в точката x, а фотонът — при процепа 1? Да предположим че фотонът е отбелязан от детектора D_1 при процеп 1 (фиг. 1.3), а също такъв детектор близо до отвора 2 следи за разсейваните там фотони. Тогава може да се говори за амплитудата за появяване на фотона в D_1, а на електрона — точката x, както и за амплитудата за появяване на фотона в D_2 и на електрона — в точката x. Да се опитаме да пресметнем тези амплитуди.



Фиг. 1.3. Опит, в който се определя през кой от отворите е преминал електрона

Въпреки че не разполагаме с правилните математически формули за всички множители, участвуващи в тези изчисления, но представа за духа на пресмятанията ще получите от следните разсъждения. Отначало имаме амплитудата $\langle 1 \mid s \rangle$ за преминаването на електрона от източника до процепа 1. След това можем да предположим, че съществува крайна амплитуда за това, електронът, преминавайки през процепа 1, да разсее фотон в детектора D_1. Да означим тази амплитуда с a. Освен това имаме амплитудата $\langle x \mid 1 \rangle$ за това, електронът след процепа 1 да достигне точката x. Амплитудата на вероятността електронът от s да премине към x през 1 и да разсее фотон в D_1, е:

$$\langle x \mid 1 \rangle a \langle 1 \mid s \rangle.$$

В нашите стари означения това ще бъде просто $a\varphi_1$.

Съществува също някаква амплитуда за това, електронът, преминавайки през процеп 2, да разсее фотон в детектора D_1. Вие ще кажете: „Това е невъзможно! Как може фотонът да се разсее в D_1, когато този детектор „гледа“ право в процепа 1?“ Ако дължината на вълната е достатъчно голяма, появяват се дифракционни ефекти и това става възможно. Разбира се, ако приборът е изготвен прецизно и се използуват само фотони с малка дължина на вълната, амплитудата за това, фотонът да бъде разсеян в D_1 от електрон, преминаващ през процепа 2, става нищожно малка. Но за общност на разсъжденията ще отчетем и този факт, че винаги има такава амплитуда и ще я означим с b. Така че амплитудата електронът да премине през процепа 2 и да разсее фотон в D_1, е:

$$\langle x \mid 2 \rangle b \langle 2 \mid s \rangle = b\varphi_2.$$

Амплитудата за откриване на електрона в x и фотон в D_1 е сума от двете събираеми — по едно за всеки от възможните пътища на електрона. Всяко събираемо от своя страна е съставено от два множителя: единия, изразяващ, че електронът е преминал през процепа и другия — че при това този електрон е разсеял фотон в D_1; имаме

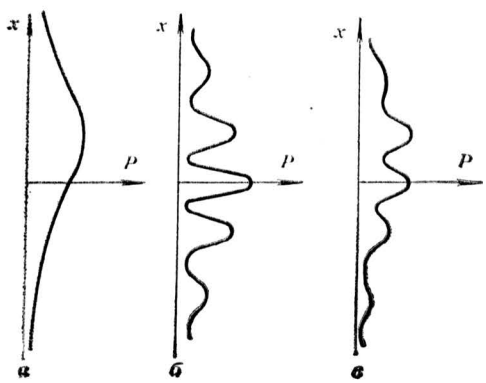
$$\left\langle \begin{matrix} \text{електрон в } x \\ \text{фотон в детектора } D_1 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \text{електрон от } s \\ \text{фотон от } L \end{matrix} \right\rangle = a\varphi_1 + b\varphi_2. \qquad (1.8)$$

Аналогичен израз може да се получи и за случая, когато фотонът ще бъде отбелязан от другия детектор D_2. Ако за простота допуснем, че системата е симетрична, a ще бъде също амплитудата за попадане на фотона в D_2, когато електронът

преминава през процепа 2, а b — амплитудата за попадане на фотона в D_2, при преминаване на електрона през 1. Съответната пълна амплитуда — амплитуда на вероятността фотонът да се окаже в D_2, а електронът в x е:

$$\left\langle \begin{matrix} \text{електрон в } x \\ \text{фотон в детектора } D_2 \end{matrix} \middle| \begin{matrix} \text{електрон от } s \\ \text{фотон от } L \end{matrix} \right\rangle = a\varphi_2 + b\varphi_1. \qquad (1.9)$$

И това е всичко. Сега вече лесно можем да пресметнем вероятностите за един или друг случай. Например искаме да знаем с каква вероятност ще се получават отчети в детектора D_1 при попадане на електрон в x. Това ще бъде квадратът на модула на амплитудата, давана от формулата (1.8), т. е. $|a\varphi_1 + b\varphi_2|^2$. Да разгледаме този израз по-внимателно. Преди всичко, ако $b=0$ (искаме нашия прибор да работи така), отговорът ще бъде $|\psi|^2$ с множител a^2. Това е точно разпределението на вероятностите, което би се получило при наличието само на един процеп, както това е показано на фиг. 1.4 *а*. От друга страна, ако дължината на вълната е голяма, разсейването от отвора 2 в детектора D_1 може да стане почти толкова голямо, колкото и от отвора 1. Въпреки че в a и b могат да участвуват всякакви фази, да разгледаме най-простия случай, когато двете фази са еднакви. Ако a практически съвпада с b, пълната вероятност ще бъде $a|^2 \cdot |\varphi_1 + \varphi_2|^2$, понеже можем да изнесем общия множител a. Но това е същото разпределение, което би се получило, ако изобщо нямаше фотони. Следователно, когато дължината на вълната е много голяма (и е безполезно да се детектират фотоните), връщаме се към първоначалното разпределение с интерференчни ефекти подобно на показаното на фиг. 1.4,*б*. Когато детектирането на фотони е възможно поне частично, възниква интерференция между голямото количество φ_1 и малкото φ_2 и получаваме междинното разпределение, показано на фиг. 1.4,*в*. Разбира се, ако ни интересуват едновременното регистриране на фотони от детектора D_2 и електрони в x, ще получим същия резултат. Ако си спомните разсъжденията от гл. 37 (т. I), ще установите, че тези резултати описват количествено това, което е разглеждано там.



Фиг. 1.4. Вероятност за регистриране на електрона в x при условие, че в D_1 е отбелязан фотон (в опитната постановка, показана на фиг. 1.3)
а) — при $b=0$; *б*) — при $b=a$; *в*)— при $0<b<a$

Необходимо е да подчертаем едно важно обстоятелство, за да ви предпазим от една често допускана грешка. Нека ни интересува само амплитудата за попадане на електрон в x, като при това е *безразлично* в кой от детекторите D_1 или D_2 попада фотонът. Трябва ли тогава да се сумират амплитудите (1.8) и (1.9)? Не! *Никога не сумирайте амплитуди на различни крайни състояния.* След като фотонът е бил регистриран от единия от детекторите, винаги можете, ако това е необходимо, да узнаете коя от двете алтернативи (от взаимно изключващите се събития) е била реализирана. За всяка алтернатива съществува своя вероятност, напълно независима от другата. Повтарям — не сумирайте амплитуди на различни крайни състояния (под „краен" разбираме онзи момент, за който ни интересува вероятността, т. е. когато опитът е „завършен"). Затова необходимо е да се сумират амплитудите за различни неразличими алтернативи в хода на самия експеримент, преди цялото завършване на процеса. Със завършването на процеса вие можете да кажете, че „ние не се интересуваме от фотона". Това е ваша лична работа, но въпреки това амплитудите не трябва да се сумират. Природата не знае какво наблюдавате вие и какво не, на нея ѝ е безразлично интересуват ли ви нейните данни или не. Отначало трябва да повдигнем на квадрат модула на амплитудата за всички възможни различни крайни състояния, а след това ги сумираме. Правилният резултат за намиране на електрона в x и фотона в D_1 или D_2 е:

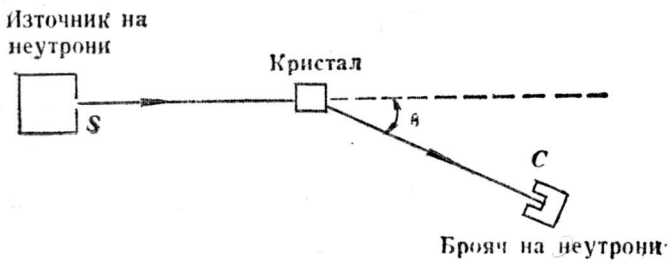
$$\left|\left\langle \begin{matrix}\text{електрон в } x \\ \text{фотон в } D_1\end{matrix} \middle| \begin{matrix}\text{електрон от } s \\ \text{фотон от } L\end{matrix} \right\rangle\right|^2 +$$

$$+\left|\left\langle \begin{matrix}\text{електрон в } x \\ \text{фотон в } D_2\end{matrix} \middle| \begin{matrix}\text{електрон от } s \\ \text{фотон от } L\end{matrix} \right\rangle\right|^2 =$$

$$=|a\varphi_1+b\varphi_2|^2+|b\varphi_1+a\varphi_2|^2. \qquad (1.10)$$

1-3. Разсейване от кристал

Следващият пример, който ще разгледаме, е явление, при което интерференцията на амплитудите на вероятностите трябва да се анализира по-внимателно. Става дума за процеса на разсейване на неутрони от кристал. Нека имаме кристал, съставен от много атоми с ядро в центъра на всеки един от тях; ядрата са разположени в периодична решетка и върху нея се насочва поток от неутрони. Ядрата в кристала можем да номерираме с индекса i, като взема целите стойности 1, 2, 3, . . . N, а N е равно на общия брой атоми. Задачата е да пресметнем вероятността даден неутрон да бъде регистриран от детектора, изобразен на фиг. 1.5. За всеки отделен атом i амплитудата за това



Фиг. 1.5. Измерване на разсейване на неутрони от кристал

неутронът да достигне детектора C е равна на амплитудата за това неутронът от източника S да попадне върху ядрото i, умножена с амплитудата a за разсейване в това място и умножена с амплитудата на това, че той от ядрото i да попадне в C. Това можем да запишем:

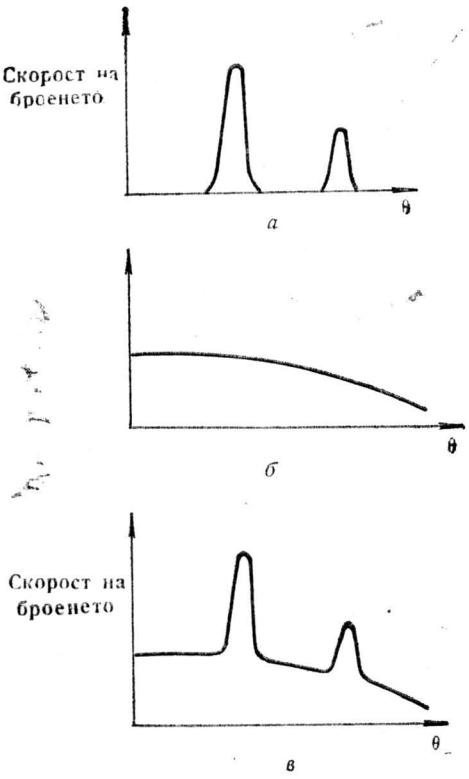
$$<\text{неутрон в } C \,|\, \text{неутрон от S}>_{\text{през } i} = <C\,|\,i>a<i\,|\,S>. \qquad (1.11)$$

При написването му предполагаме, че амплитудата за разсейване a е една и съща за всички атоми. В този случай имаме множество неразличими пътища. Те са неразличими понеже неутрон с малка енергия, разсейвайки се от ядрото без при това да избива атом от мястото му в кристала, не оставя никакъв „знак“ върху разсейвателя. Съгласно нашите предишни разсъждения пълната амплитуда за неутрон да попадне в C ще съдържа сума по всички атоми на израза от вида (1.11):

$$<\text{неутрон в } C \,|\, \text{неутрон от } S> = \sum_{i=1}^{N} <C\,|\,i>a<i\,|\,S>. \qquad (1.12)$$

Поради това, че се сумират амплитуди за разсейване от различно разположени в пространството атоми, амплитудите ще имат различни фази и това ще създава характерната интерференчна картина, каквато вече анализирахме при разглеждането на разсейване на светлина от решетка.

И наистина при подобни опити интензитетът на неутроните като функция на ъгъла често има силни изменения — много остри интерференчни върхове, между които няма нищо (фиг. 1.6, a). Но в опити с някои други кристали картината не е същата при тях наред с интерференчните върхове се наблюдава и общ



Фиг. 1.6. Скоростта на броене на неутроните като функция от ъгъла
а) — за ядро със спин 0;
б) — вероятност за разсейване с обръщане на спина;
в) — наблюдавана скорост на броене за ядра със спин $^1/_2$

фон от разсейването във всички посоки (фиг. 1.6, *в*). Трябва да се опитаме да разберем причината за този тайнствен вид на картината. Работата е в това, че не взехме под внимание едно важно свойство на неутрона. Неговият спин е 1/2 и затова той може да се намира в две състояния: спинът му да е насочен нагоре или надолу. Ако ядрата на кристала не притежават спин, тогава и спинът на неутрона няма да оказва никакво въздействие. Но ако ядрата на кристала имат спин, равен, да речем, също на 1/2, то интерференчната картина ще получи споменатия по-горе фон. Обяснението е следното.

Ако спинът на неутрона има дадена посока и спинът на ядрото — същата посока, в процеса на разсейването посоката на спина няма да се измени. Ако спиновете на неутрона и ядрото имат противоположни посоки, разсейването може да се извърши чрез два процеса, като при единия посоките не се изменят, докато при другия разсейването става с изменение на посоките. Правилото, че сумата на спиновете в даден процес не трябва да се изменя, е аналогично на класическия закон за запазване на момента на количество на движение. Сега можем да разберем разглежданото явление, ако предположим, че всички ядра, на които става разсейването, имат една и съща ориентация на спиновете. Тогава неутрон със същата посока на спина ще се разсейва така, че в резултат ще се получава тясно интерференчно разпределение. Какво ще стане с неутрон с противоположна посока на спина? Ако той се разсее, без да изменя посоката на спина, в картината няма да се промени нищо, но ако при разсейването двата спина си изменят посоките, тогава може да се посочи ядрото, на което е станало разсейването, понеже именно това ядро ще си е изменило посоката на спина. Но щом като имаме възможност да окажем от кое ядро е станало разсейването, каква роля играят останалите атоми в този процес? Разбира се, никаква. Разсейването става като от отделен атом.

За да се отчете този ефект, трябва да се видоизмени математическата формулировка на уравнението (1.12), понеже в този анализ състоянията не бяха напълно характеризирани. Нека отначало всички неутрони, изпускани от източника, да имат спин насочен нагоре, а всички ядра на кристала — спин, насочен надолу. Отначало е необходимо да знаем амплитудата за процеса, когато в детектора попадат неутрони с посока на спина, насочени нагоре и всички спинове на ядрата на кристала остават насочени надолу. Това по нищо не се различава от предишните ни разсъждения. Да означим с a амплитудата за разсейване без обръщане на спина. Разбира се, амплитудата за разсейване от i-тия атом е:

$$<C \text{ нагоре, кристал надолу} \mid S \text{ нагоре, кристал надолу}> =$$
$$= <C \mid i> a <i \mid S>.$$

Понеже всички атоми имат спинове, насочени надолу, различните възможности (за различни стойности на i) не могат да бъдат различни помежду си. В този процес всички амплитуди интерферират.

Но има и случаи, когато спинът на детектирания неутрон е насочен надолу, въпреки че в началното състояние в S той е бил насочен нагоре. Това означава, че при разсейването едно ядро в кристала, да кажем на k-тия атом, е обърнало посоката на спина си нагоре. Да допуснем, че за всички атоми амплитудата на разсейване с обръщане на спина е една и съща и да я означим с b. (В реалния кристал съществува още една неприятна възможност: преобърнатият спин да премине в някое друго съседно ядро в кристала, но нека допуснем, че вероятността за такъв процес в нашия кристал е малка). Тогава амплитудата за разсейване е

$$<C \text{ надолу, ядрото } k \text{ нагоре} \mid S \text{ нагоре, кристал надолу}> =$$
$$= <C \mid k> b <k \mid S>. \qquad (1.13)$$

Ние искаме да знаем каква е вероятността неутронът да се окаже със спин, насочен надолу, а k-тото ядро — със спин, насочен нагоре. Тази вероятност ще бъде равна на квадрата на модула на амплитудата, т. е. $|b|^2$, умножена с $|\langle C|k\rangle\langle k|S\rangle|^2$. Вторият множител почти не зависи от местоположението на k-тия атом в кристала и при повдигането на модула в квадрат всички фази изчезват. По такъв начин вероятността за разсейване *от кое да е ядро* от кристала с обръщане на спина ще бъде равна на

$$|b|^2 \sum_{k=1}^{N} |\langle C|k\rangle\langle k|S\rangle|^2,$$

което дава гладкото разпределение, показано на фиг. 1.6, *б*.

Вие можете да възразите: „А мен не ме интересува кое ядро си е обърнало спина“. Нека бъде така, но нали природата знае това и в действителност вероятността се оказва такава, каквато се дава от горната формула — не настъпва никаква интерференция. А ако вас ви интересува вероятността в детектора да попадат неутрони със спин, насочен нагоре, докато в кристала ядрата остават, както и по-рано, със спин, насочен надолу, то необходимо е да се вземе квадратът на модула на сумата:

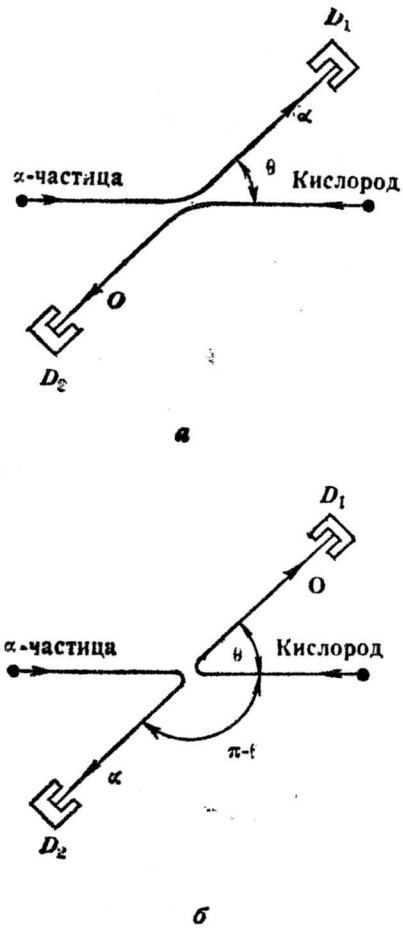
$$\sum_{i=1}^{N} \langle C|i\rangle a \langle i|S\rangle.$$

Тъй като всяко събираемо в тази сума има своя фаза, те интерферират и се появява рязка интерференчна картина. А ако провеждаме опит, в който не следим за спина на разсеяните неутрони, могат да се извършат събития и от двата вида и тогава вероятностите за отделните събития ще се наслагват. Пълната вероятност (или скоростта на броене на детектора) като функция на ъгъла изглежда подобно на кривата на фиг. 1.6, *в*.

Нека още веднаж разгледаме физиката на този опит. Ако имате принципна възможност да различавате взаимноизключващите се крайни състояния (макар в действителност да не правите това), пълната крайна вероятност ще се получи чрез пресмятането на *вероятностите за всяко отделно събитие* (а не амплитудите им) и тяхното сумиране. А ако *по принцип не можете* да различавате крайните състояния, тогава е необходимо отначало да сумирате амплитудите на вероятностите и след това да вземете квадрата на модула на тази сума — това ще бъде и търсената вероятност. Обърнете внимание на това, че ако се опитате да представите неутрона като отделна вълна, вие ще получите едно и също разпределение както за разсеяните неутрони със спин, насочен надолу, така и за тези със спин, насочен нагоре. Бихте могли да кажете, че „вълната“ на неутрони със спинове, насочени надолу, идва от различни атоми и интерферира по такъв начин, както би интерферирала неутронна вълна с еднаква дължина и насочени нагоре спинове. Но вие знаете, че в действителност това не е така. Както вече отбелязахме, трябва да бъдем внимателни и да не се опитваме да си представяме прекалено реално вълната в пространството. Тези представи са полезни за някои случаи, но не за всички.

1-4. Тъждествени частици

Следващият опит, който искаме да опишем, илюстрира едно от забележителните следствия на квантовата механика. В него отново ще се срещнем с такива физически събития, в които съществуват два неразличими пътя и както винаги при такива обстоятелства възниква интерференция на амплитудите. Ще разгледаме разсейването на ядра от други ядра при сравнително ниски енергии. Да вземем за пример α-частици (както знаете то-



Фиг. 1.7. Разсейване на α-частици от кислородни ядра, наблюдавано в система на центъра на масите

ва са хелиеви ядра), които бомбардират кислородни ядра. За да облекчим анализа на реакцията, ще го проведем в координатна система, свързана с центъра на масите на системата, в която скоростите на ядрото на кислорода и α-частицата преди сблъскването имат противоположни посоки, а след сблъскването — също противоположни посоки (фиг. 1.7,*а*). (Разбира се, големините на тези скорости са различни, понеже масите на частиците са различни). Да предположим също, че енергията се запазва и че енергията на сблъскване е толкова малка, че частиците нито се чупят, нито преминават във възбудени състояния. Причината за разсейването на частиците е едноименният положителен електричен заряд на двете ядра и, изразявайки се с езика на класическата физика, трябва да кажем, че те се отклоняват, преминавайки близо една до друга. Разсейването на различни ъгли ще става с различна вероятност и ние искаме да определим ъгловата зависимост при подобно разсейване. (Разбира се, всичко това може да се пресметне с помощта на класическата физика и по една удивителна случайност се оказва, че отговорът на този въпрос в класическата и квантова механика е един и същ. Това е много интересно, защото при никакъв закон за силите освен при реципрочната зависимост от квадрата на разстоянието не е така и изглежда това наистина е случайност.)

Вероятността за разсейване в различни посоки може да се измери с опитна постановка показана на фиг. 1.7,*а*. Детекторът D_1 може да бъде конструиран така, че да регистрира само α-частиците, а детекторът D_2 да отбелязва само кислородните ядра. (В координатната система на центъра на масите детекторите ще бъдат насочени един срещу друг, докато в лабораторната координатна система – не.) Експериментът се свежда до измерване на вероятността за разсейване в различните посоки. Ако с $f(\theta)$ означим амплитудата за разсейване в детекторите, когато те са разположени под ъгъл θ, опитно определяната вероятност ще бъде $|f(\theta)|^2$.

Би могло да се проведе и друг опит, в който детекторите да регистрират *и* α-частиците, *и* кислородните ядра, без да ги различават помежду им. Сега трябва да съобразим какво ще стане, ако решим да не се грижим за вида на попадналата в детектора частица. Разбира се, когато ядрото на кислорода лети в посока θ, под ъгъл $(\pi-\theta)$ ще лети α-частицата. Следователно, ако $f(\theta)$ е амплитудата за разсейване на кислорода под ъгъл θ, $f(\pi-\theta)$ ще бъде амплитудата за разсейване на α-частицата под ъгъл θ[1]. По такъв начин вероятността *някаква* частица да попадне в детектора D_1 е

$$\text{вероятността за попадане на } \textit{някаква} \text{ частица в } D_1 = |f(\theta)|^2 + |f(\pi-\theta)|^2. \qquad (1.14)$$

Обърнете внимание, че по принцип двете състояния са различими! Въпреки че в този опит *не ги различаваме, ние бихме могли* да правим това. И в съответствие с нашите предишни разсъждения необходимо е да събираме вероятностите, а не амплитудите.

Приведеният по-горе резултат е верен за много различни видове ядра. За мишена могат да послужат и кислород, и въглерод, и берилий, и водород. Но той *не е верен* при разсейване на α-частици от α-частици. В този единствен случай, когато двете частици са напълно еднакви, експерименталните данни не се съгласуват с предсказването по формула (1.14). Например вероят-

[1] Изобщо посоката на разсейване трябва да се описва от два ъгъла — полярен φ и азимутален θ. Тогава би трябвало да се каже, че ядрото на кислорода се разсейва в посоката (θ, φ), а α-частицата — в посоката (π—θ, φ+π). Но за кулоновото разсейване (и за много други случаи) амплитудата на разсейване не зависи от φ. Така че амплитудата за разсейване на кислорода под ъгъл θ съвпада с амплитудата за разсейване на α-частицата под ъгъл (π—θ).

ността за разсейване на ъгъл 90° е точно два пъти по-голяма от изискването по изложената по-горе теория. Ако мишената е He^3, а бомбардираме с α-частици (He^4), всичко е наред. И само когато мишената е He^4, т. е. ядрата на мишената са тъждествени с бомбардиращите ядра, разсейването се изменя с ъгъла по друг начин.

Може би вече се досещате каква е работата? α-частицата може да бъде регистрирана от детектора в два случая: или при разсейване на ъгъл θ, или при разсейване на ъгъл $(\pi-\theta)$. Как можем да установим коя частица е попаднала в детектора — частицата-снаряд или частицата-мишена? Никак. В случая на разсейване на α-частици от α-частици съществуват две възможности, които е невъзможно да се различат. Следователно *амплитудите* на вероятностите интерферират и вероятността трябва да се представи като сума на амплитудите на двете неразличими събития. Затова вероятността α-частицата да попадне в детектора ще се дава от квадрата на модула на тази сума:

$$\text{вероятността } \alpha\text{-частица да попадне в } D_1 = |f(\theta)+f(\pi-\theta)|^2. \qquad (1.15)$$

Това съвсем не е формулата (1.14). Да вземем например ъгъл на разсейване $\frac{\pi}{2}$ (което можем по-лесно да си представим). При $\theta=\frac{\pi}{2}$ ще имаме $f(\theta)=f(\pi-\theta)$, така че по (1.15) пълната вероятност ще бъде:

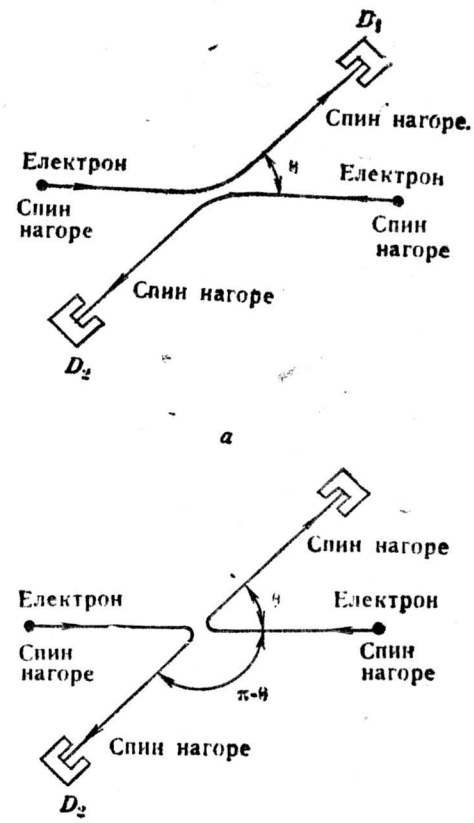
$$\left|f\left(\frac{\pi}{2}\right)+f\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2=4\left|f\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2.$$

От друга страна, ако няма интерференция, формулата (1.14) би дала само $2\left|f\left(\frac{\pi}{2}\right)\right|^2$. Така че на ъгъл 90° се разсейват два пъти повече частици, отколкото би трябвало да се очаква. Разбира се, при други ъгли на разсейване резултатите ще бъдат други. Така достигаме до необикновения извод: когато частиците са тъждествени, става нещо ново, каквото не се наблюдава, когато частиците са различими. При математическото описание длъжни сте да събирате амплитудите на взаимноизключващите се процеси, в които двете частици просто си разменят ролите и става интерференция.

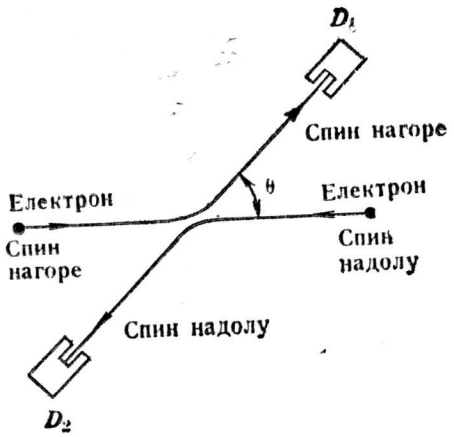
Още по-неочаквано е явлението при разсейване на електрони от електрони или протони от протони. Тогава не е верен нито един от изложените досега резултати! За тези частици е необходимо да използуваме съвършено ново правило: ако попаднали-ят в дадена точка електрон обменя своята индивидуалност с друг електрон, новата амплитуда интерферира със старата в *противофаза*. Това е пак интерференция, но с обратен знак. В случая с α-частиците, когато се извършва обмен на α-частици, амплитудите интерферират с еднакъв знак. А в *случая на електрони амплитудите при обмена интерферират с различни знаци*. С точност до една подробност, която ще бъде обяснена малко по-нататък, правилната формула за електроните в опит, подобен на изобразения на фиг. 1.8, е:

$$\text{вероятността електронът да попадне в } D_1 = |f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2. \qquad (1.16)$$

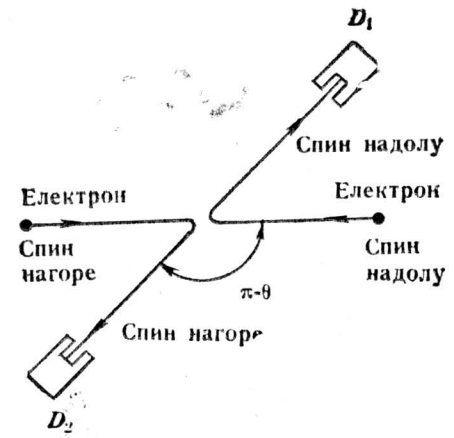
Това твърдение изисква уточняване, понеже не сме взели пред вид спина на електроните (α-частиците имат спин 0). Може да считаме, че спинът на електрона е насочен нагоре или надолу спрямо плоскостта на разсейване. Ако енергията на разсейването е достатъчно малка, магнитните сили, възникващи от токовете, ще бъдат слаби и не ще повлияят на спина. Да предположим,



Фиг. 1.8. Разсейване на електрони от електрони. Ако спиновете на удрящите се електрони са успоредни, процесите *а* и *б* са неразличими



а



б

Фиг. 1.9. Разсейване на електрони с антипаралелни спинове

че в нашия анализ това в действителност е така и няма вероятност при сблъскването спиновете да се обърнат. Какъвто е биспинът преди сблъскването, такъв си остава и след него. Сега вече можем да видим, че съществуват най-различни възможности: частицата-снаряд и частицата-мишена могат да имат спинове, насочени нагоре, надолу или в различни посоки. Ако и двата спина са насочени в еднаква посока, както на фиг. 1.8 след разсейването, спиновете остават същите и *амплитудата* на процеса ще се дава от *разликата* между амплитудите за двата възможни случая, показани на същата фигура. Тогава *вероятността* електронът да попадне в детектора D_1 ще се дава от формулата (1.16).

Да предположим, че спинът на бомбардиращите частици е насочен нагоре, а на частиците-мишени — надолу. Спинът на електрона, попадащ в детектора D_1, може да се окаже насочен или нагоре, или надолу и, измервайки този спин, можем да кажем откъде е този електрон — от снопа бомбардиращи частици или от частиците на мишената. Тези две възможности са показани на фиг. 1.9; по принцип те са различими и затова няма интерференция, а просто се сумират двете вероятности. Всичко това е вярно и когато двата спина са преобърнати, т. е. спинът на лявата частица е насочен надолу, а спинът на дясната — нагоре.

Накрая, ако електроните излитат със случайни посоки на спина (например неполяризиран сноп от нажежена волфрамова нишка), с еднаква вероятност всеки електрон може да излети със спин, насочен нагоре или насочен надолу. Когато в провеждания опит не се измерва спина на бомбардиращите електрони, това е т. нар. опит с неполяризирани частици. Резултатът от такъв експеримент най-добре може да се изчисли, като се пресметнат всички мислими възможности, както това е направено в табл. 1.1

Таблица 1.1

Разсейване на неполяризирани частици със спин 1/2

Част от случаите	Спин на частиците преди разсейването 1	2	Спин на частиците в детекторите		Вероятност
1/4	нагоре	нагоре	нагоре	нагоре	$\lvert f(\theta)-f(\pi-\theta)\rvert^2$
1/4	надолу	надолу	надолу	надолу	$\lvert f(\theta)-f(\pi-\theta)\rvert^2$
1/4	нагоре	надолу	нагоре	надолу	$\lvert f(\theta)\rvert^2$
			надолу	нагоре	$\lvert f(\pi-\theta)\rvert^2$
1/4	надолу	нагоре	нагоре	надолу	$\lvert f(\pi-\theta)\rvert^2$
			надолу	нагоре	$\lvert f(\theta)\rvert^2$

$$\text{Пълна вероятност} = \frac{1}{2}\,|f(\theta)-f(\pi-\theta)|^2 + \frac{1}{2}\,|f(\theta)|^2 + \frac{1}{2}\,|f(\pi-\theta)|^2.$$

За всяка различима възможност трябва отделно да се пресметне *вероятността*. Тогава пълната вероятност е сумата на всички отделни вероятности. Забележете, че в случая на неполяризирани снопове резултатът при $\theta = \frac{\pi}{2}$ е половината от класическия резултат за независими частици.

Поведението на тъждествените частици води до много интересни следствия; в следващата глава ще разгледаме тези неща по-подробно.

2

Тъждествени частици

2-1. Бозе-частици и ферми-частици

В предишната глава започнахме да разглеждаме особените правила, по които става интерференцията в процесите с две *тъждествени* частици. *Тъждествени* считаме такива частици, които подобно на електроните е невъзможно да се различат една от друга. Ако в процеса участвуват две тъждествени частици, заменянето на попадащата в детектора частица с друга е неотличима алтернатива, която, както във всички случаи на неотличими алтернативи, интерферира с първоначалния случай, когато не е имало такъв обмен. Тогава за амплитудата на събитието се взема сумата от двете интерфериращи амплитуди и съществото тук е, че в някои случаи интерференцията става във *фаза*, а в други — в *противофаза*.

Да си представим, че се сблъскват две частици a и b, като частицата a се разсейва в посоката *1*, а частицата b — в посоката *2* (фиг. 2.1,*а*). Нека $f(\theta)$ да бъде амплитудата за този процес; тогава вероятността P_1 да имаме подобен процес ще бъде пропорционална на $|f(\theta)|^2$. Разбира се, може да се случи частицата b да се разсее в посока 1, а частицата a — в посока 2 (фиг. 2.1,*б*). Ако приемем, че няма никакви избрани посоки, определени от спина на частиците или някое друго тяхно индивидуално свойство, вероятността P_2 за подобно събитие ще бъде $|f(\pi-\theta)|^2$, защото този процес е просто еквивалентен на първия процес, в който детекторът 1 е поставен под ъгъл $(\pi-\theta)$. Може да ви се стори, че *амплитудата* за втория процес трябва да бъде равна на $f(\pi-\theta)$, но това не е вярно, понеже тук можем да имаме произволен фазов множител. С други думи, амплитудата би могла да бъде:

$$e^{i\delta} f(\pi-\theta),$$

защото и такава амплитуда дава вероятност за процеса $P_2 = |f(\pi-\theta)|^2$.

Да видим сега какво би станало, ако частиците a и b бяха идентични. Тогава не бихме могли да различим помежду им двата процеса, показани на фиг. 2.1. Съществува амплитуда частицата a (или b) да попадне в детектора 1, докато другата частица попада в детектора 2. Амплитудата за такъв процес ще бъде сума от амплитудите на двата процеса, показани на фиг. 2.1.

Ако първата амплитуда означим с $f(\theta)$, втората ще бъде $e^{i\delta} f(\pi-\theta)$ и сега фазовият множител е много важен, понеже ни предстои да сумираме амплитудите. Да предположим, че сме длъжни да умножаваме амплитудите с някакъв фазов множител всеки път, когато двете частици разменят ролите си. Ако частиците се разменят повторно, фазовият множител ще се появи отново втори път. Но при това се връщаме към първоначалния процес и затова фазовият множител, взет два пъти, трябва да ни върне към процеса, с който сме започнали — неговият квадрат трябва да бъде равен на единица. Съществуват само две възможности: $e^{i\delta}$ да бъде равно на $+1$ или -1. Размяната дава принос *със същия* или с *противоположен* знак. И двата случая се срещат в природата — всеки за своя клас частици. Частиците, интерфериращи с *положителен* знак, се наричат *бозе-частици*, а онези, които интерферират с *отрицателен* знак, се наричат *ферми-частици*. Ферми-частици са електронът, μ-мезонът, двата вида неутрино, нуклоните и барионите. И така амплитудата на

2-1. Бозе-частици и ферми-частици

2-2. Състояния с две бозе-частици

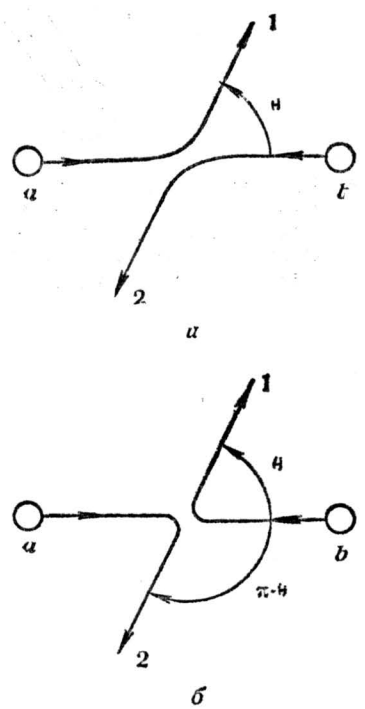
2-3. Състояния с n бозе-частици

2-4. Излъчване и поглъщане на фотони

2-5. Спектър на абсолютно черното тяло

2-6. Течен хелий

2-7. Принцип на забраната



Фиг. 2.1. При разсейване на две тъждествени частици процесите *а* и *б* са неразличими

разсейване за тъждествени частици има вида:

за бозе-частици:

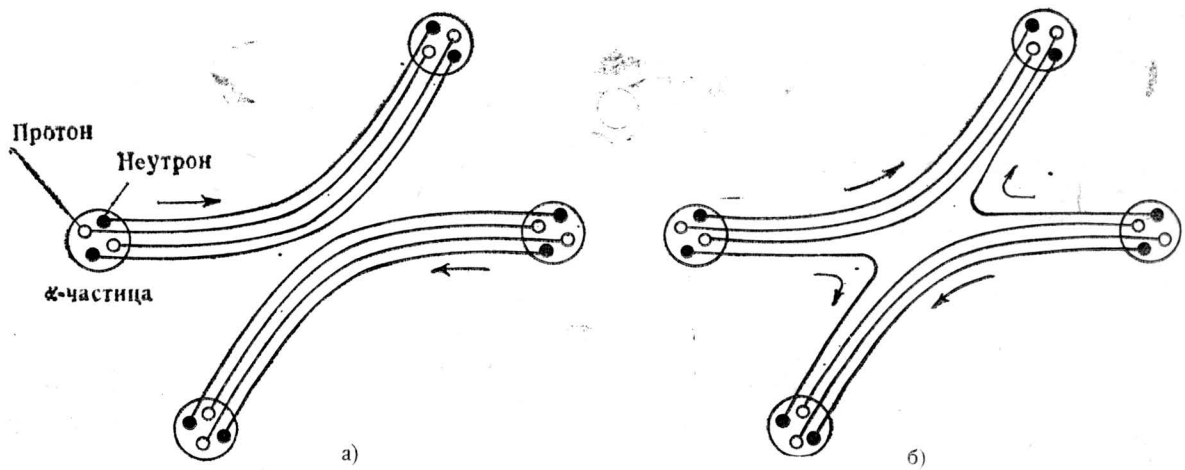
(Амплитудата на процеса)+(Амплитудата на обмена); (2.1)

за ферми-частици:

(Амплитудата на процеса)—(Амплитудата на обмена). (2.2)

За частици със спин (например електрони) възниква допълнително усложнение. Налага се да се посочи не само местоположението на частиците, но и посоката на спиновете им. Само в този случай, когато частиците са идентични и техните *спинови състояния са също идентични,* — само тогава амплитудите интерферират. А ако се интересувате от разсейването на неполяризирани снопове, представляващи смес от различни спинови състояния, ще се наложат и други пресмятания.

Интересна задача възниква при наличието на две или повече тясно свързани частици. Например, α-частицата се състои от четири частици: два неутрона и два протона. Затова, когато се разсейват две α-частици, са възможни няколко случая. Може да се случи така, че при разсейването да се прояви крайната амплитуда за това един от неутроните да премине от едната α-частица в другата, а неутрон от последната да премине обратно в първата α-частица, така че двете α-частици след разсейването да се окажат не първоначалните частици, понеже между тях е станала размяна на двойка неутрони (фиг. 2.2). Амплитудата на разсейване с обмен на двойка неутрони ще интерферира с амплитудата за разсейване без обмен, като интерференцията трябва да има знак минус, защото става обмен на ферми-частици. От друга страна, ако относителната енергия на двете α-частици е толкова малка, че те се намират сравнително далеч една от друга (например поради кулоновото отблъскване) и вероятността за обмен между съставящите частици е незначителна, можем да разглеждаме α-частиците като прости обекти, пренебрегвайки вътрешния им строеж. При тези условия в амплитудата за разсейване ще участвуват само два члена: или въобще не настъпва обмен, или при разсейването става обмен на всичките четири нуклона. Понеже и протоните, и неутроните в α-частицата са ферми-частици, обменът между коя и да е двойка нуклони изменя знака на амплитудата. Докато вътре в α-частицата няма изменение, обменът на две α-частици означава същото, каквото и обменът на четири двойки ферми-частици. Всяка двойка изменя знака и в резултат амплитудите се събират със знак плюс. Така че α-частицата има поведение на бозе-частица.



Фиг. 2.2. Разсейване на две α-частици
а — двете частици запазват своята индивидуалност; *б* — по време на разсейването се извършва обмен на неутрони

Следователно правилото е, че сложни обекти при обстоятелства, когато могат да се считат за неделими, имат поведение на бозе- или ферми-частици в зависимост от това, четен или нечетен брой ферми-частици съдържат.

Всички елементарни ферми-частици, за които споменахме (като електрона, протона, неутрона и др.), имат спин $j=\frac{1}{2}$. Ако няколко такива частици образуват сложен обект, общият му спин може да бъде или цял, или полуцял. Например най-разпространеният изотоп на хелия He^4, който е съставен от два протона и два неутрона, има спин, равен на нула, а литият Li^7, съставен от три протона и четири неутрона, има спин $\frac{3}{2}$. По-късно ще изучим и правилата за сумиране на моментите на количество на движение, а сега нека само отбележим, че всеки сложен обект с *полуцял спин* имитира *ферми-частица*, докато всеки сложен обект с *цял спин* имитира *бозе-частица*.

Интересно е да разберем защо става така? Защо частици с полуцял спин са ферми-частици, чиито амплитуди се сумират с отрицателен знак, а частици с цял спин са бозе-частици и техните амплитуди се сумират с положителен знак? Моля за извинение, че не мога да дам елементарно обяснение на този факт. Но обяснение съществува и то бе дадено от Паули въз основата на сложни доводи от квантовата теория на полето и теорията на относителността. Паули показа, че тези факти по необходимост са свързани един с друг; но сега ние не можем да приведем елементарни аргументи за неговото доказателство. Изглежда че това е едно от немногото положения във физиката, когато правилото се формулира много просто, докато такова просто обяснение не е намерено. Корените на това обяснение лежат дълбоко в релативистичната квантова механика. Изглежда това означава, че все още не разбираме докрай принципа, лежащ в неговата основа. Затова ще го приемем като един от законите на Вселената.

2-2. Състояния с две бозе-частици

Сега искаме да обсъдим едно интересно следствие от правилото за сумиране на амплитуди за бозе-частици. То се отнася до поведението на частици, когато те са повече от една. Да започнем със случая на разсейване на две бозе-частици от два различни разсейвателя. Няма да ни интересуват подробностите на механизма на разсейването, а само едно: какво става с разсеяните частици. Нека имаме случая, показан на фиг. 2.3. Частицата a след разсейването се е оказала в състояние 1. Под *състояние* разбираме дадена посока и енергия на частицата или някои други зададени условия. Нека частицата b се е разсеяла в състояние 2. Да предположим, че състоянията 1 и 2 са почти еднакви. (Всъщност бихме искали да получим амплитудите за разсейването на две частици в едно и също състояние, но ще бъде по-добре, ако преди това поразмислим над случая, какво ще стане когато състоянията са почти еднакви, а след това изведем какво става при пълното им съвпадение.)

Ако имахме само частицата a, за нея щеше да съществува амплитудата за разсейване в посоката 1 — нека я означим с $\langle 1 \mid a\rangle$. Аналогично за частицата b щеше да съществува амплитуда $\langle 2 \mid b\rangle$ за разсейване в посоката 2. Ако частиците не бяха тъждествени, амплитудата за това, че в едно и също време ще възникнат двете разсейвания е равна на произведението:

$$\langle 1 \mid a\rangle\langle 2 \mid b\rangle.$$

Вероятността за същото събитие тогава е равна

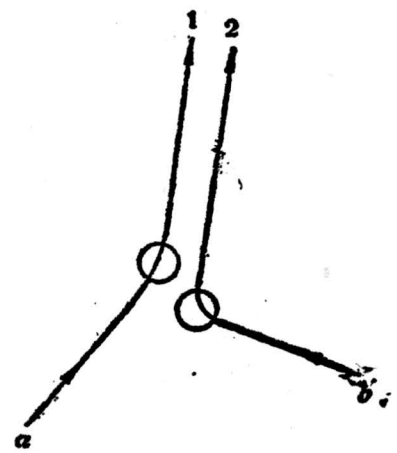
$$|\langle 1 \mid a\rangle\langle 2 \mid b\rangle|^2,$$

което също е равно на

$$|\langle 1 \mid a\rangle|^2 \cdot |\langle 2 \mid b\rangle|^2.$$

За да съкратим записването, ще положим

$$\langle 1 \mid a\rangle = a_1, \qquad \langle 2 \mid b\rangle = b_2.$$



Фиг. 2.3. Двойно разсейване в близки крайни състояния

Тогава вероятността за двойното разсейване е:

$$|a_1|^2 . |b_2|^2.$$

Би могло да се случи частицата b да се разсее в посоката 1, а частицата a — в посоката 2. Амплитудата за такъв процес би била

$$<2|a><1|b>,$$

а вероятността за това събитие

$$|<2|a><1|b>|^2=|a_1|^2 . |b_1|^2.$$

Да си представим сега, че имаме два съвсем малки брояча, които регистрират разсеяните частици. Вероятността P_2 тези броячи да регистрират едновременно и двете частици е:

$$P_2=|a_1|^2 . |b_2|^2+|a_2|^2 . |b_1|^2. \tag{2.3}$$

Сега ще положим, че посоките 1 и 2 са много близки. Ще считаме, че a се мени плавно при изменение на посоката, тогава a_1 и a_2 трябва да се приближат едно към друго при сближаването на посоките 1 и 2. При достатъчно сближаване амплитудите a_1 и a_2 се изравняват; можем да положим $a_1=a_2$ и да означим всяка от тях с a; по същия начин можем да положим $b_1=b_2=b$. Така получаваме

$$P_2=2|a|^2 . |b|^2. \tag{2.4}$$

Нека сега предположим, че частиците a и b са тъждествени бозе-частици. Тогава преходът на a в състояние 1 и преходът на b в състояние 2 не може да се различи от обменен процес, при който b преминава в 1, а a — в 2. В този случай *амплитудите* на двата различни процеса ще интерферират. *Пълната* амплитуда за това във всеки от броячите да попадне по една частица е

$$<1|a><2|b>+<2|a><1|b>, \tag{2.5}$$

а вероятността броячите да регистрират тези частици се дава от квадрата на модула на тази амплитуда:

$$P_2=|a_1b_2+a_2b_1|^2=4|a|^2|b|^2. \tag{2.6}$$

В резултат получаваме, че *вероятността* да установим две *идентични* бозе-частици, разсеяни в едно и също състояние, е *два пъти* по-голяма в сравнение с вероятността при *предположение, че частиците са различими*.

Макар да считахме, че частиците се регистрират от два различни детектора — това е несъществено. В това можем да се убедим по следния начин. Да предположим, че и двете посоки 1 и 2 довеждат частиците до *един и същ* малък брояч, който се намира на определено разстояние. Ние ще определим посоката 1, като казваме, че тя гледа в лицев елемент dS_1 от повърхността на брояча. Посоката 2 гледа в елемент dS_2 на брояча. (Считаме, че броячите представляват повърхнини, перпендикулярни на линията на разсейване.) Сега вече не можем да говорим за вероятност частицата да бъде насочена точно в някакво направление или в *определена точка* на пространството. Това е възможно — шансът да регистрираме коя и да е определена посока е равен на нула. Ако е необходима определена точност, трябва да изразим така нашите амплитуди, че да дават вероятността за попадане в единица площ на брояча. Нека имаме само една частица a, която има определена амплитуда за разсейване в посоката 1. Нека $<1|a>=a_1$ да бъде амплитудата за разсейване на частицата a *в единица площ* на брояча, разположен в посоката 1. С други думи, избираме мащаба a_1 и казваме, че тя е „нормирана“ така, че вероятността частицата a да бъде разсеяна в лицев елемент dS_1 от площта на брояча е

$$|<1|a>|^2 dS_1=|a_1|^2 dS_1. \tag{2.7}$$

Ако цялата площ на брояча е ΔS и ние заставим dS_1 да я обходи, пълната вероятност частицата да бъде разсеяна в брояча ще бъде:

$$\int_{\Delta S} |a_1|^2 \, d S_1 . \tag{2.8}$$

Както и по-рано ще считаме брояча толкова малък, че амплитудата a_1 по неговата повърхнина да не се изменя много; следователно a_1 ще бъде постоянно число и можем да го означим с a. Тогава вероятността частицата a да бъде регистрирана от брояча ще бъде

$$p_a = |a|^2 \Delta S. \tag{2.9}$$

По същия начин достигаме до извода, че частицата b може да бъде разсеяна в лицев елемент dS_2 с вероятност

$$|b_2|^2 dS_2.$$

(Ние казваме dS_2, а не dS_1 пред вид на това, че по-нататък на частиците a и b ще бъде разрешено да се движат в различни посоки.) Нека пак положим b_2 равно на постоянната амплитуда b; тогава вероятността частицата да бъде регистрирана от брояча е

$$p_b = |b|^2 \Delta S. \tag{2.10}$$

Ако имаме две частици, вероятността за разсейване на a в dS_1 и b в dS_2 ще бъде:

$$|a_1 b_2|^2 dS_1 dS_2 = |a|^2 |b|^2 dS_1 dS_2. \tag{2.11}$$

Ако трябва да знаем вероятността и *двете* частици (и a, и b) да попаднат в брояча, трябва да интегрираме dS_1 и dS_2 по цялата площ ΔS; така ще получим:

$$P_2 = |a|^2 |b|^2 (\Delta S)^2. \tag{2.12}$$

Нека отбележим между другото, че тази вероятност е равна на $p_a . p_b$, точно както би било, ако предполагахме, че частиците a и b действуват независимо една от друга.

Но когато двете частици са тъждествени, съществуват две неразличими възможности за всяка двойка лицеви елементи dS_1 и dS_2. Случаят на частица a, попаднала в dS_2, и частицата b, попаднала в dS_1, е неразличим от случая, когато a е попаднала в dS_1 и b — в dS_2, и затова амплитудите на тези два процеса ще интерферират. (Когато имахме две *различни* частици, макар че в *действителност* да не се интересувахме коя от тях в кой брояч попада, все пак *по принцип* бихме могли да знаем това и затова интерференция не настъпва. А за тъждествени частици и по принцип не можем да знаем това.) Ето защо длъжни сме да пишем, че вероятността двете частици да попаднат съответно в dS_1 и dS_2 е

$$|a_1 b_2 + a_2 b_1|^2 dS_1 dS_2. \tag{2.13}$$

Но сега при интегрирането по повърхността на брояча трябва да бъдем внимателни. Оставяйки dS_1 и dS_2 да обхождат цялата площ ΔS, бихме отчели всяка площ *два* пъти, понеже в (2.13) влиза всичко, което може да се случи с всяка от двойката лицеви елементи dS_1 и dS_2[1]. Въпреки това можем да пресметнем интеграла, като отчетем това двукратно участие, разделяйки получения резултат на две. Така интересуващата ни вероятност за тъждествени бозе-частици е

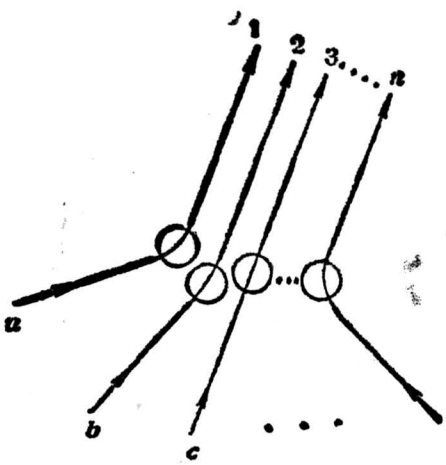
[1] Размяната на dS_1 с dS_2 в израза (2.11) води до друго събитие, така че лицевите елементи трябва да описват цялата площ. В 2.13 разглеждаме dS_1 и dS_2 като *двойка* и включваме всичко, което може да се случи. Ако сега интегралите включат отново всичко, което може да се случи, когато dS_1 и dS_2 си разменят местата, ще се окаже, че всичко се пресмята два пъти.

$$P_2(\text{бозе}) = \frac{1}{2}\{4 \mid a \mid^2 \mid b \mid^2 (\Delta S)^2\} = 2 \mid a \mid^2 \mid b \mid^2 (\Delta S)^2. \quad (2.14)$$

И отново тази стойност е два пъти по-голяма от получената в (2.12) за случай на различими частици.

Ако за миг допуснем, че по някакъв начин знаем, че каналът b вече е изпратил частицата си в своята посока, то можем да кажем, че *вероятността* втората частица да бъде изпратена в същата посока е два пъти по-голяма от тази, която бихме могли да очакваме, ако предположехме, че тези събития са независими. Това е характерно свойство на бозе-частиците: ако една частица се намира в дадени условия, вероятността да поставим в същите условия втора частица е два пъти по-голяма, отколкото ако първата частица не беше там. Този факт често се формулира така: ако вече имаме една бозе-частица в дадено състояние, амплитудата да поставим там, „върху главата ѝ", втора подобна частица е $\sqrt{2}$ пъти по-голяма, отколкото ако първата частица не беше там. (Това не е много подходящ начин за формулиране на този резултат от тази физическа точка, която сме избрали, но ако прилагаме последователно това правило, винаги ще достигаме до верни резултати.)

2-3. Състояния с n бозе-частици



Фиг. 2.4. Разсейване на n частици в близки крайни състояния

Сега ще разпространим получения резултат за случая, когато имаме n бозе-частици. Нека разгледаме случая, показан на фиг. 2.4. Имаме n частици—$a, b, c, \ldots$, които се разсейват в посоките 1, 2, 3, . . . , n. Всички n са насочени към малък детектор, поставен някъде по-далеч. Както и в предишния параграф, да изберем такава нормировка за всички амплитуди, при която вероятността всяка частица, разсейвайки се самостоятелно, да попадне в лицев елемент dS, да бъде:

$$| < \quad > |^2 \, dS.$$

Нека отначало предположим, че всички частици са различими, така че вероятността n частици да бъдат едновременно регистрирани в n различни лицеви елементи да бъде:

$$| a_1 b_2 c_3 \ldots |^2 \, dS_1 dS_2 dS_3 \ldots . \quad (2.15)$$

И пак ще приемем, че амплитудите не зависят от разположението на елементите dS върху детектора (той се счита малък) и да ги означим с $a, b, c, \ldots$. Вероятността (2.15) ще се запише:

$$| a |^2 \mid b \mid^2 \mid c \mid^2 \ldots dS_1 dS_2 dS_3 \ldots \quad (2.16)$$

Обхождайки с всеки елемент dS цялата повърхнина на брояча ΔS, намираме, че P_n (различни) — вероятността едновременно да бъдат регистрирани n различни частици — е:

$$P_n(\text{различни}) = | a |^2 \mid b \mid^2 \mid c \mid^2 \ldots (\Delta S)^2. \quad (2.17)$$

Този израз е произведение на вероятностите за попадане в детектора на всяка частица поотделно. Всички частици действуват независимо — вероятността за попадане на една частица в детектора не зависи от това колко други частици са попаднали там преди това.

Сега да предположим, че всички тези частици са идентични бозе-частици. За всяка съвкупност от посоки 1, 2, 3, . . . съществуват много неразличими възможности. Ако например имаме само три частици, ще бъдат възможни следните случаи:

$a \to 1$	$a \to 1$	$a \to 2$
$b \to 2$	$b \to 3$	$b \to 1$
$c \to 3$	$c \to 2$	$c \to 3$
$a \to 2$	$a \to 3$	$a \to 3$
$b \to 3$	$b \to 1$	$b \to 2$
$c \to 1$	$c \to 2$	$c \to 1$.

Получават се шест различни комбинации. А ако частиците са n, възможните комбинации са $n!$ макар и *неразличими* една от друга; затова амплитудите им трябва да се сумират. Вероятността n частици да бъдат регистрирани в n лицеви елемента ще бъде

$$|a_1b_2c_3\ldots+a_1b_3c_2\ldots+\text{ и т. н. }\ldots|^2dS_1dS_2\ldots dS_n. \quad (2.18)$$

И пак ще предположим, че всички посоки са толкова близки една до друга, че можем да положим $a_1=a_2=\ldots=a_n=a$, и същото да направим и с b, и с c, и т.н.; вероятността (2.18) става:

$$|n!\ abc\ \ldots|^2\ dS_1dS_2\ldots dS_n. \quad (2.19)$$

Когато всеки елемент dS обходи цялата площ ΔS на детектора, всяко мислимо произведение на лицевите елементи ще се смята $n!$ пъти; отчитаме това, разделяйки на $n!$, и получаваме:

$$P_n(\text{бозе})=\frac{1}{n!}\,|n!\ abc\ \ldots|^2\,(\Delta S)^n,$$

или

$$P_n(\text{бозе})=n!\ |abc\ \ldots|^2\,(\Delta S)^n. \quad (2.20)$$

Като сравним този резултат с израза (2.17), виждаме, че вероятността за едновременно попадане на n бозе-частици е $n!$ пъти по-голяма, отколкото при предположението, че частиците са различими. Този израз може да се запише така:

$$P_n(\text{бозе})=n!\ P_n(\text{различни}). \quad (2.21)$$

И така вероятността в случай на бозе-частици е $n!$ пъти по-голяма отколкото за случая, когато частиците действуват независимо.

Ще разберем това явление по-добре, ако се запитаме: на какво е равна вероятността бозе-частица да премине в някакво състояние, в което *вече имаме n други частици*? Да означим добавъчната частица с w. Ако всичко, включително и частицата w, имаме $(n+1)$ частици, изразът (2.20) става

$$P_{(n+1)}\ (\text{бозе})=\ (n+1)!\ (abc\ \ldots w\,|^2\,(\Delta S)^{n+1}, \quad (2.22)$$

което можем да запишем като

$$P_{(n+1)}(\text{бозе})=\{(n+1)\,|w|^2\,\Delta S\}\,n!\,|abc\ \ldots|^2\,(\Delta S)^n \quad (2.23)$$

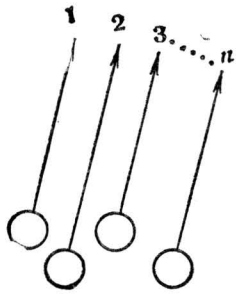
или във вида

$$P_{(n+1)}(\text{бозе})=(n+1)\,|w|^2\,\Delta S P_n(\text{бозе}).$$

Този резултат може да се изтълкува по следния начин. Числото $|w|^2\,\Delta S$ представлява вероятността в детектора да попадне частицата w, ако там няма други частици; $P_{n\,(\text{бозе})}$ е вероятността в детектора вече да са попаднали n други бозе-частици. Следователно формула (2.23) показва, че *когато* имаме n други идентични бозе-частици, вероятността да получим в същото състояние *още една* подобна частица се увеличава $(n+1)$ пъти. Вероятността да регистрираме още един бозон, когато вече имаме n такива, е $(n+1)$ пъти по-голяма от тази, когато там няма нито една такава частица. *Наличието* на други частици увеличава вероятността там да попадне още една такава частица.

2-4. Излъчване и поглъщане на фотони

Дотук навсякъде в нашите разсъждения ставаше дума за процеси, подобни на разсейването на α-частици. Обаче това вече не е задължително; можем да разглеждаме и раждане на частици, например излъчването на светлина. При този процес се „раждат" фотони. Сега не са необходими входящите линии на фиг. 2.4; можем просто да считаме, че имаме n атома $a, b, c, \ldots$, излъч-



Фиг. 2.5. Образуване на n фотони в близки състояния

ващи светлина (фиг. 2.5). Следователно можем да формулираме нашия резултат и така: *вероятността атом да излъчи фотон в дадено крайно състояние се увеличава* $(n+1)$ *пъти, ако в това състояние вече имаме* n *фотона.*

Някои предпочитат да изказват този резултат по друг начин. Те казват, че *амплитудата* за изпускане на фотон се увеличава $\sqrt{n+1}$ пъти, ако вече имаме в наличност n фотона. Разбира се, това е само друг начин да се каже същото, като се има пред вид, че за да получим вероятността за процеса, трябва да повдигнем амплитудата в квадрат.

В квантовата механика е в сила твърдението, че амплитудата за получаване на състоянието χ от всяко друго състояние φ е комплексно спрегната на амплитудата за получаване на φ от χ:

$$<\chi\,|\,\varphi>=<\varphi\,|\,\chi>^{*}.$$

С това ще се занимаваме малко по-късно, а за сега нека приемем, че това е вярно. Използувайки това, можем да разберем как фотони се разсейват или поглъщат *от* дадено състояние. Знаем, че амплитудата фотон да попадне в някакво състояние, да кажем i-тото, в което вече има n фотона, е

$$<n+1\,|\,n>=\sqrt{n+1}\;a, \tag{2.25}$$

където $a=<i\,|\,a>$ е амплитудата за преминаване на i-тия фотон в състояние, в което няма нито един фотон. Ако използуваме формула (2.24), амплитудата за обратния преход – от $(n+1)$ фотона към n фотона, е

$$<n\,|\,n+1>=\sqrt{n+1}\;a^{*}. \tag{2.26}$$

Обикновено се казва по друг начин; на хората не им харесва да мислят за преход от състояние с $(n+1)$ фотона в състояние с n фотона, а предпочитат да започват от състояние с n фотона. Затова се казва, че амплитудата за поглъщане на фотон, когато имаме n фотона, т. е. амплитудата за преход от n към $(n-1)$, е равна:

$$<n-1\,|\,n>=\sqrt{n}\;\;a^{*}. \tag{2.27}$$

Разбира се, това е същата формула, както и (2.26). Но сега възниква нова грижа — да помним кога се пише $\sqrt{n}$ и кога $\sqrt{n+1}$. Това може да се запомни по следния начин: множителят винаги е равен на корен квадратен от най-голямото число, равно на броя на наличните фотони — все едно до процеса или след него. Уравненията (2.25) и (2.26) показват, че всъщност законът е симетричен: несиметричен изглежда само записан във вида (2.27).

От тези правила произтичат голям брой различни физически следствия и сега искаме да разгледаме едно от тях, свързано с излъчването на светлина. Да си представим случая, когато фотоните се намират в „кутия“ и че стените на тази кутия са огледални. Освен това нека в тази кутия в едно и също състояние (т. е. с една и съща честота, поляризация и посока) имаме n неразличими помежду си фотона, и пак в тази кутия да имаме един атом, който може да излъчи още един фотон в същото състояние. Вероятността за излъчване на такъв фотон е равна на

$$(n+1)\,|\,a\,|^{2}, \tag{2.28}$$

а вероятността атомът в кутията да погълне този фотон 1

$$n|\,a\,|^{2}, \tag{2.29}$$

където $|\,a\,|^{2}$ е вероятността за излъчване на фотон, когато отсъствуват останалите n фотона. Вече споменахме за тези правила по малко по-различен начин в гл. 42 (т. I). Изразът (2.29) показва, че вероятността атомът *да погълне* фотон и да премине в състояние с по-висока енергия е пропорционална на интензитета на облъчващата го светлина. Но, както показа Айнщайн, скоростта,

с която атомът преминава в *по-ниско* енергетично състояние, е съставена от две части. Съществува вероятност $|a|^2$ атомът да извърши самопроизволен преход, а също и вероятност за принуден преход $n|a|^2$, пропорционална на интензитета на светлината, т. е. на броя на наличните фотони. По-нататък, както забелязал Айнщайн, коефициентите на поглъщане и принудително излъчване са равни помежду си и са свързани с вероятността за самопроизволно, спонтанно излъчване. Вече обяснихме, че ако измерваме интензитета на светлината с количеството налични фотони (вместо да използуваме енергията в единица обем или за секунда), коефициентите на поглъщане, принудително и спонтанно излъчване са равни помежду си. Такъв е смисълът на отношенията между коефициентите A и B, изведени от Айнщайн [виж гл. 42, т. I, уравнение (42.18)].

2-5. Спектър на абсолютно черно тяло

Сега искаме да използуваме установените от нас правила, за да изведем още веднаж спектъра на излъчване на абсолютно черно тяло (виж гл. 42, т.I). Ще направим това, като пресметнем колко фотона се съдържат в резонансната кухина („кутия"), когато излъчването се намира в топлинно равновесие с атомите в кутията. Да допуснем, че на всяка светлинна честота ω съответствува определено количество N атома с две енергетични състояния, различаващи се с енергия $\Delta E = \hbar\omega$ (фиг. 2.6). Състоянието с по-малка енергия се нарича „основно", а с по-голямата енергия — „възбудено". Нека $N_{\text{осн.}}$ и $N_{\text{възб.}}$ да са средният брой атоми в основното и възбудено състояние; тогава от статистическата механика следва, че при топлинно равновесие при температура T трябва да имаме

$$\frac{N_{\text{възб.}}}{N_{\text{осн.}}} = e^{-\Delta E/kT} = e^{-\hbar\omega/kT} . \qquad (2.30)$$

Всеки атом от основното състояние може да погълне фотон и да премине във възбудено състояние, както и всеки атом от възбудено състояние — да изпусне фотон и да премине в основно състояние. При равновесие скоростите на тези два процеса трябва да бъдат равни. Самите скорости са пропорционални на вероятностите за събитията и количеството налични атоми. Нека $\bar{n}$ да е средният брой фотони, намиращи се в дадено състояние с честота ω. Тогава скоростта за поглъщане от това състояние е $N_{\text{осн.}}\,\bar{n}\,|a|^2$, а скоростта за излъчване на фотони в това състояние е $N_{\text{възб.}}\,(\bar{n}+1)\,|a|^2$. Приравнявайки двете скорости, получаваме

$$N_{\text{осн.}}\,\bar{n} = N_{\text{възб.}}\,(\bar{n}+1). \qquad (2.31)$$

Като го сравним с (2.30), намираме

$$\frac{\bar{n}}{\bar{n}+1} = e^{-\hbar\omega/kT},$$

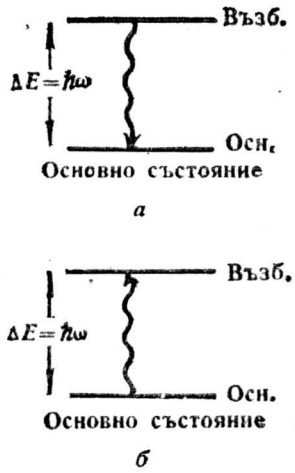
откъдето

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT}-1} . \qquad (2.32)$$

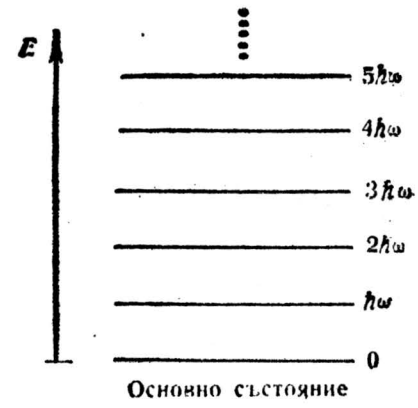
Това е средният брой фотони с честота ω в кое да е състояние при топлинно равновесие в кухината. Понеже енергията на всеки фотон е $\hbar\omega$, енергията на фотоните в даденото състояние ще бъде $\bar{n}\hbar\omega$, т.е.

$$\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT}-1} . \qquad (2.33)$$

Впрочем, вече сме получили подобен израз при разглеждането на друго явление [виж гл. 41, т. I, ф-ла (41.15)]. Спомнете си, че за хармоничния осцилатор (например тежест, закачена на пружина) квантовомеханичните нива на енергията се намират на равни



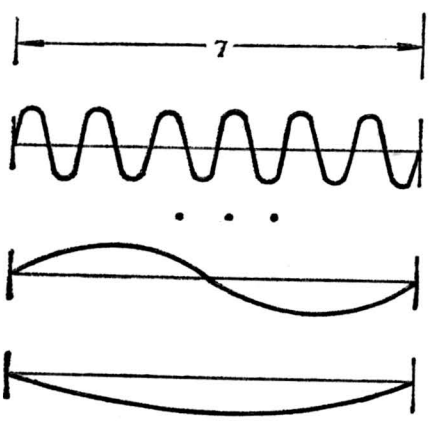
Фиг. 2.6. Излъчване и поглъщане на фотон с честота ω



Фиг. 2.7. Енергетични нива на хармоничен осцилатор

разстояния $\hbar\omega$ едно от друго, както това е показано на фиг. 2.7. Означавайки енергията на n-тото ниво с $n\hbar\omega$, тогава получихме, че енергията на такъв осцилатор се дава също от израза (2.33). А сега такъв израз получаваме за фотоните чрез пресмятане на техния брой. Пред нас е едно от чудесата на квантовата механика. Ако започнем да разглеждаме такива състояния или такива условия за бозе-частици, когато те не взаимодействуват помежду си (защото предположихме, че фотоните също не взаимодействуват един с друг), а след това приемем, че в тези състояния могат да се намират на нула, една, две и т. н. до n бозе-частици, то се оказва, че тази система има квантовомеханично поведение, във всяко отношение подобно на поведението на хармоничен осцилатор. Такъв осцилатор се счита динамична система, подобна на малко топче, закрепено на пружина, или стоящи вълни в резонансната кухина. Ето защо можем да си представим електромагнитното поле като съвкупност от фотони. От една страна електромагнитното поле вътре в „кутията“ или кухината може да се анализира в термините на множеството хармонични осцилатори, като разглеждаме според квантовата механика всеки тип колебание като хармоничен осцилатор. От друга страна, същото явление може да се анализира с термините на тъждествените бозе-частици. Резултатите и от двата начина на разсъждение винаги точно съвпадат. Невъзможно е да се установи трябва ли в действителност електромагнитното поле да се описва като квантова система хармонични осцилатори, или да се задава чрез количеството фотони във всяко състояние. И двата възгледа се оказват математически тъждествени. По-нататък ще можем с еднакво право да говорим или за броя на фотоните в дадено състояние на кутията, или за номера на енергетичното ниво, свързано с определен тип колебание на електромагнитното поле. Това са два начина да се изрази едно и също нещо. Същото се отнася и за фотоните във вакуум. Те са еквивалентни на колебания в резонансната кухина, чиито стени са отдалечени до безкрайност.

Ние пресметнахме средната енергия на един частен тип колебание в „кутия“ при температура T. За да получим закона за излъчване на абсолютно черното тяло, остава да установим още следното: колко типа колебания имаме при всяка енергия. (Предполагаме, че за всеки вид колебание ще се намерят и съответните атоми в кутията (или в стените ѝ), които имат енергетични нива, способни да доведат към излъчване на колебание от този тип, така че всеки тип може да се установи в топлинно равновесие.) Законът за излъчване на абсолютно черното тяло обикновено се формулира като се каже колко енергия в единица обем се отнася от светлина в малък интервал от честоти между ω и $\omega+\Delta\omega$. Така че е необходимо да знаем колко типа колебания с честоти в интервала $\Delta\omega$ имаме в кутията. Макар че този проблем възниква и в квантовата механика, той представлява чисто класически проблем, свързан със стоящите вълни.



Фиг. 2.8. Типове стоящи вълни

Ще разгледаме само случая на правоъгълна „кутия“. За кутия с произволна форма изводите са същите, само че пресмятанията са много по-сложни. Освен това нашата „кутия“ има много по-големи размери от дължината на светлинните вълни. В такъв случай ще имаме огромен брой типове колебания; във всеки малък интервал от честоти $\Delta\omega$ техният брой ще бъде много голям, така че може да се говори за техния „среден брой“ във всеки такъв интервал. Да започнем с едномерния случай — да определим колко типа колебания имаме при опъната струна. Вие знаете, че всеки тип колебание представлява синусоида с нулеви амплитуди в краищата; с други думи, върху цялата дължина на струната трябва да се нанесат цяло число полувълни (фиг. 2.8). Ние предпочитаме да използуваме вълновото число $k=\frac{2\pi}{\lambda}$; означавайки вълновото число на $j^{\text{тото}}$ колебание с k_j, ще имаме:

$$k_j=\frac{j\pi}{L}, \tag{2.34}$$

където j е цяло число. Интервалът δk между две последователни вълни е

$$\delta k = k_{j+1} - k_j = \frac{\pi}{L}.$$

Удобно е да използуваме толкова големи kL, че в малък интервал Δk да има много на брой типове колебания. Ако означим този брой в интервала Δk с $\Delta\mathfrak{N}$, ще имаме

$$\Delta\mathfrak{N} = \frac{\Delta k}{\delta k} = \frac{L}{\pi}\,\Delta k. \tag{2.35}$$

Физиците-теоретици, занимаващи се с квантова механика, обикновено предпочитат типовете колебания да бъдат два пъти по-малко; те пишат

$$\Delta\mathfrak{N} = \frac{L}{2\pi}\,\Delta k. \tag{2.36}$$

И ето защо: теоретиците обичат да мислят на езика на бягащите вълни — движещи се надясно (с положително k) и движещи се наляво (с отрицателни k). Но „тип колебание“ или „собствено колебание“ *е стояща* вълна, т. е. сума от две бягащи вълни, движещи се всяка в своя посока. С други думи, те считат, че всяка стояща вълна включва две различни фотонни „състояния“. Затова, ако под $\Delta\mathfrak{N}$ разбираме броя на фотонните състояния с дадено k (където k може да бъде положително или отрицателно), тогава $\Delta\mathfrak{N}$ ще се окаже два пъти по-малко. (Всички интеграли ще трябва да се вземат в граници от $k=-\infty$ до $k=+\infty$ и общият брой на състоянията се получава колкото трябва). Разбира се, при това стоящите вълни не могат да се описват достатъчно добре, но пресмятането на типовете колебания ще върви съгласувано.

Сега ще обобщим нашите резултати за случая с три измерения. Стоящата вълна в правоъгълна кутия трябва да притежава цяло число полувълни *по всяка ос*. Двумерният случай е показан на фиг. 2.9. Всяка посока и честота на вълната се описва от вектора на вълновото число $\mathbf{k}$. Неговите x-, y- и z-компоненти трябва да удовлетворяват уравнения от вида (2.34). Така че имаме

$$k_x = \frac{j_x \pi}{L_x}, \qquad k_y = \frac{j_y \pi}{L_y}, \qquad k_z = \frac{j_z \pi}{L_z}.$$

Броят на колебанията с k_x в интервала Δk_x, както и по-рано ще бъде

$$\frac{L_x}{2\pi}\,\Delta k_x;$$

същото за Δk_y и за Δk_z. Ако означим с $\Delta\mathfrak{N}(\kappa)$ броя на такива типове колебания, в които x-компонентата на векторното вълново число $\mathbf{k}$ лежи в интервала между k_x и $k_x+\Delta k_x$, y-компонента в интервала между k_y и $k_y+\Delta k_y$ и съответно k_z в интервала k_z и $k_z+\Delta k_z$, то

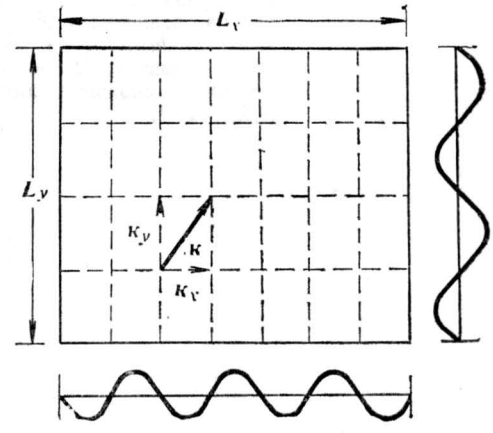
$$\Delta\mathfrak{N}(\kappa) = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3}\,\Delta k_x\,\Delta k_y\,\Delta k_z. \tag{2.37}$$

Произведението $L_x L_y L_z$ дава обема V на кутията. Така достигаме до важния резултат, че за големи честоти (дължини на вълните по-малки от размерите на кухината) броят на типовете колебания в кутията е пропорционален на нейния обем V и на „обема на k-пространството“ $\Delta k_x\,\Delta k_y\,\Delta k_z$. Този резултат се появява в различни други задачи и заслужава да се запомни:

$$\Delta\mathfrak{N}(\kappa) = V\,\frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \tag{2.38}$$

Макар и да не сме го доказали, резултатът не зависи от формата на кутията.

Сега ще приложим тези резултати, за да определим броя на



Фиг. 2.9. Типове стоящи вълни в две измерения

типовете колебания за фотони с честоти в интервала $\Delta\omega$. Интересува ни енергията на различните собствени колебания, а не посоката на самите вълни. Искаме да знаем броя на собствените колебания в дадения честотен интервал. Във вакуум големината на $\mathbf{k}$ е свързана с честотата по формулата

$$|\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c}. \tag{2.39}$$

Следователно в интервала от честоти $\Delta\omega$ попадат всички типове колебания, съответстващи на онези вектори $\mathbf{k}$, чиито големини се изменят от k до $k+\Delta k$, независимо от посоката. „Обемът в k-пространството" между k и $k+\Delta k$ е сферичен слой с обем, равен на

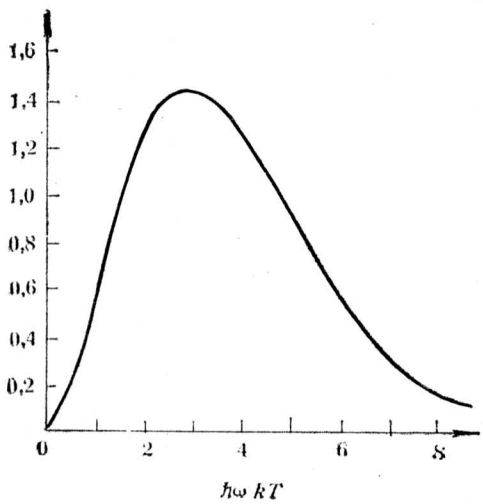
$$4\pi k^2\ \Delta k.$$

Количеството на собствени колебания (моди) ще бъде:

$$\Delta\mathfrak{N}(\omega) = \frac{V\ 4\pi^2 k^2\ \Delta k}{(2\pi)^3}. \tag{2.40}$$

Но понеже ни интересуват честотите, трябва да поставим $k = \frac{\omega}{c}$ и получаваме:

$$\Delta\mathfrak{N}(\omega) = \frac{V\ 4\pi\ \omega^2\ \Delta\omega}{(2\pi)^3\ c^3}. \tag{2.41}$$



Фиг. 2. 10. Спектър на честотите излъчване в кухина при топлинно равновесие (спектър на „абсолютното черно тяло").
По ординатната ос е нанесена величината $x^3/e^x - 1$ $(x = \hbar\omega/kT)$, която се различава от $dE/d\omega$ с постоянен множител $(\pi\hbar)^2 (c/kT)^3\ V^{-1}$.

Но тук възниква едно усложнение. Щом говорим за собствени колебания на електромагнитни вълни, на всеки даден вълнов вектор k може да съответствува коя да е от двете възможни поляризации (перпендикулярни една на друга). Понеже тези собствени колебания са независими, необходимо е (за светлината) да удвоим техния брой. Така получаваме:

$$\Delta\mathfrak{N}(\omega) = \frac{V\ \omega^2\ \Delta\omega}{\pi^2\ c^3} \quad \text{(за светлината)}. \tag{2.42}$$

Вече показахме [(вж. 2.33)], че всяко собствено колебание (мода, тип колебание, „състояние") притежава средна енергия

$$\overline{n\hbar\omega} = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}.$$

Като умножим този израз с броя на собствените колебания, получаваме енергията ΔE, която имат собствените, лежащи в честотния интервал $\Delta\omega$:

$$\Delta E = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/kT} - 1} \cdot \frac{V\omega^2\ \Delta\omega}{\pi^2\ c^3}. \tag{2.43}$$

Този израз всъщност представлява спектралния закон за излъчване на абсолютно черното тяло, изведен вече веднаж в гл. 41, т. I. Вие виждате, че резултатът зависи от това, че фотоните са бозе-частици, които имат тенденция да се събират всички в едно и също състояние (амплитудата за такова поведение е голяма). Вие помните, че именно при изучаване на спектъра на абсолютно черното тяло (който е представлявал загадка за класическата физика) Планк извежда формула (2.43), поставяйки началото на квантовата физика.

2-6. Течен хелий

Течният хелий при ниски температури притежава ред странни свойства, за подробното описание на които, за съжаление, не ни достига време. Много от тях са свързани с факта, че атомите на хелия са бозе-частици. Едно от тези свойства е липсата на вискозитет. В действителност това е „сухата" вода, за която говорихме в една от предишните глави (при условие, че скоростта на

протичане е достатъчно малка). Причината за такова поведение се крие в следното: за да притежава една течност вискозитет, необходимо е в нея да съществуват вътрешни загуби на енергия; трябва някаква част от течността да се движи не така, както останалата течност. Това означава, че трябва да съществува възможност някои атоми да попадат в състояния, различни от онези, в които се намират останалите атоми. Но при достатъчно ниски температури, когато топлинното движение става много слабо, всички атоми се стремят да попаднат при едни и същи условия. Така, ако някои от атомите се движат на една страна, то и всички останали атоми ще се стремят да се движат по същия начин. Тази своеобразна „привързаност“ към характера на движението е трудно да се разбие на неправилни турболентни части, както това би било например с независими частици. По такъв начин в течност от бозе-частици съществува силен стремеж всички частици да преминат в едно състояние — стремеж, изразен с множителя $\sqrt{n+1}$, получен от нас по-рано. (А в бутилка с течен хелий, разбира се, n е много голямо!) Това движение не се наблюдава при по-високи енергии, понеже топлинната енергия е достатъчна, за да приведе атомите във всевъзможни различни по-висши състояния. Но при достатъчно понижаване на температурата внезапно настъпва момент, когато всички атоми на хелия започват да се стремят да се окажат в едно и също състояние. Хелият става свръхтечен. Впрочем, това явление възниква само при изотопа на хелия с атомно тегло 4. Отделните атоми на изотопа на хелия с атомно тегло 3 са ферми-частици и течността е най-обикновена. Понеже свръхфлуидност се среща само при He^4, напълно очевидно е, че този ефект е квантовомеханичен, предизвикан от бозе-природата на α-частиците.[1]

2-7. Принцип на забрана

Ферми-частиците имат съвършено друго поведение. Да видим какво ще стане, ако се опитаме да поставим две ферми-частици в едно и също състояние. Да се върнем към нашия първоначален пример и се заинтересуваме от амплитудата, две идентични ферми-частици да се разсеят в почти еднакви посоки. Амплитудата за частицата a да попадне в посоката 1, а частицата b — в посоката 2 е

$$<1\,|\,a><2\,|\,b>,$$

а амплитудата посоките на двете частици да разменят местата си е

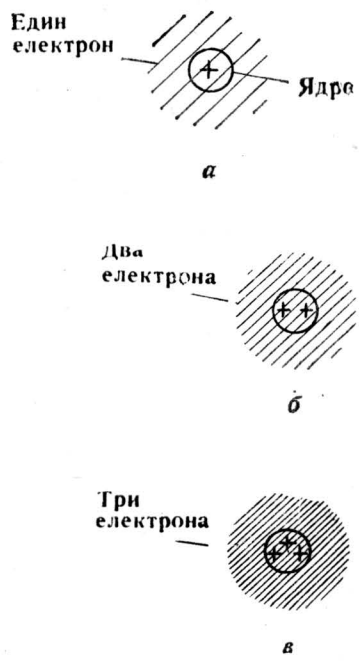
$$<2\,|\,a><1\,|\,b>.$$

Понеже имаме работа с ферми-частици, амплитудата за този процес е разлика между двете амплитуди:

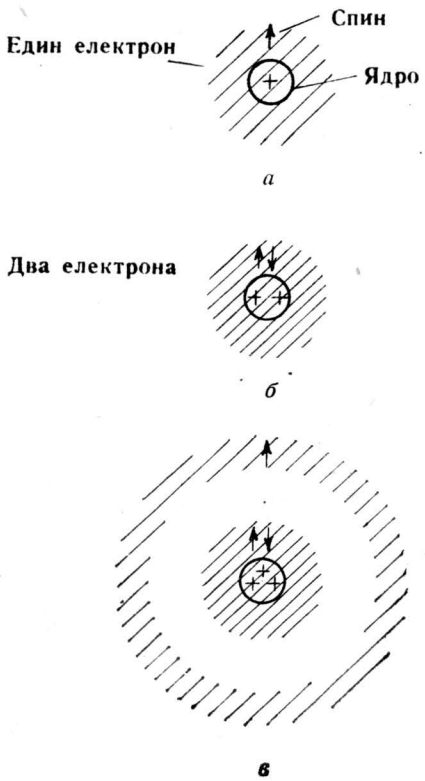
$$<1\,|\,a><2\,|\,b> - <2\,|\,a><1\,|\,b>. \qquad (2.44)$$

Трябва да подчертаем, че под „посока 1“ разбираме не само определената посока на движение на частицата, но и дадена посока на нейния спин, а „посоката 2“ почти съвпада с посоката 1 и отговаря на *същата* посока на спина. Тогава $<1\,|\,a>$ и $<2\,|\,a>$ ще бъдат приблизително равни. (Това би могло и да не бъде така, ако състоянията 1 и 2 на частиците не притежаваха еднакви спинове, защото тогава може да се окаже, че амплитудите зависят от посоката на спина.) Ако сега направим посоките 1 и 2 да се доближат една до друга, пълната амплитуда в уравнение (2.44) ще стане равна на нула. Както виждате, резултатът за ферми-частиците е много по-прост, отколкото за бозе-частиците. Абсолютно невъзможно е две ферми-частици, например електрони, да

[1] В действителност явлението свръхфлуидност бе открито и при He^3 (бел. бълг. ред.)



Фиг. 2.11. Така биха изглеждали атомите, ако електроните имат поведение на бозе-частици



Фиг. 2.12. Атомни конфигурации за реални, фермиевски електрони със спин $^1/_2$

се окажат в едно и също състояние. Никога не ще можете да откриете два електрона в еднакво положение и с еднакви посоки на спина. Невъзможно е два електрона да имат един и същ импулс и една и съща посока на спина. Ако те се окажат в еднакво състояние на движение, единственото, което им остава, е да се завъртят един срещу друг.

Какво следва от всичко това? Съществуват множество забележителни ефекти, произтичащи от факта, че две ферми-частици не могат да попадат в едно и също състояние. Всъщност почти всички особености на материалния свят се дължат на този изумителен факт. Цялото разнообразие на елементите в периодичната таблица е следствие само от това правило.

Разбира се, ние не можем да кажем на какво би приличал светът, ако това правило, но само то, беше друго; защото то представлява само част от цялата структура на квантовата механика и е невъзможно да се прецени какво още би се изменило, ако това правило, отнасящо се за ферми-частиците, станеше друго. Но все пак нека се опитаме да си представим какво би се случило, ако се измени само това правило. Първо, може да се покаже, че всеки атом би останал повече или по-малко неизменен. Да започнем с атома на водорода. Той не би се изменил забележимо. Протонът на ядрото щеше да бъде обкръжен от сферично симетричен електронен облак (фиг. 2.11, *а*). Както вече писахме в гл. 38 (т. I), макар и електронът да се привлича към центъра, принципът на неопределеността изисква да имаме равновесие между разпределението в пространството и разпределението по импулса. Равновесието означава, че разпределението на електроните трябва да се характеризира с определена енергия и протяжност, определящи характерните размери на водородния атом.

Нека сега разгледаме ядро с две единици електрически заряд, например ядрото на хелиевия атом. Това ядро ще привлича два електрона, и ако те са бозе-частици, при пренебрегване на кулоновото отблъскване между тях те щяха да се стремят да се концентрират по възможност по-близко около ядрото. Атомът на хелия би изглеждал като на фиг. 2.11, *б*. По същия начин атомът на лития, който притежава трикратно заредено ядро, щеше да има електрони, разпределени подобно на показаното на фиг. 2.11, *в*. Всеки атом би изглеждал повече или по-малко като описаните: кръгло топче, всички електрони на което са натрупани около ядрото; нямаше да съществуват никакви избрани посоки и никакви сложни неща.

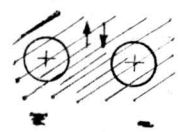
Но поради това, че електроните са ферми-частици, истинското положение на нещата е съвършено друго. За атома на водорода то не се изменя съществено. Единствената разлика е тази, че електронът притежава спин (показан на фиг. 2.12, *а* със стрелка). В случая на хелиевия атом не можем да поставим двата електрона един върху друг. Всъщност това е невъзможно само, ако посоките на двата спина са еднакви. Но ако спиновете са насочени в различни посоки, те *ще имат право* да заемат едно и също място. Така че и при атома на хелия нещата не се променят много. Той ще изглежда така, както е показано на фиг. 2.12,*б*. Обаче при атома на лития нещата се изменят съществено. Къде ще поставим третия електрон? Невъзможно е да го поставим върху другите два, защото вече и двете посоки на спина са заети. (Вие помните, че за електроните и за всички частици със спин $^1/_2$ съществуват само две допустими посоки на спина.) Третият електрон не може да се приближи към мястото, заето от другите два електрона, и е длъжен да се разположи някъде по-далеч от ядрото (фиг. 2.12, *в*). (Тук говорим за всичко това доста грубо, тъй като трите електрона са тъждествени, и щом не можем да ги разпознаем, то рисунката ще бъде вярна в най-общи линии.)

Сега вече можем да разберем защо различните атоми имат различни химични свойства. Поради това, че третия електрон в лития се намира по-далеч от ядрото, той е свързан с него по-слабо. Да се отдели един електрон от лития е много по-лесно,

отколкото от хелиев атом. (Опитът показва. че за йонизацията на хелия са необходими 25 волта, докато за лития — само 5 волта.) Това именно определя и валентността на литиевия атом. Валентните свойства, свързани с посоката на спина, зависят от вълновата картина на външния електрон, но засега няма да навлизаме в тези подробности. От всичко това става ясно значението на т. нар. *принцип на забраната*, който твърди, че никога два електрона не могат да се окажат точно в едно и също състояние (включително и спина).

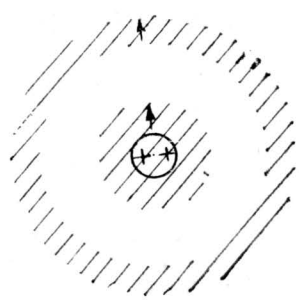
Принципът на забраната определя също и едромащабната стабилност на веществото. Вече обяснихме, че отделните атоми на веществото не се сливат в едно, поради принципа на неопределеността. Тогава може да се разбере, защо два водородни атома не се доближават неограничено близо един до друг, защо всички протони не се събират заедно, образувайки около себе си електронен облак. Отговорът, разбира се, се състои в това, че щом на едно и също място не могат да се намират повече от два електрона с противоположни спинове, то и атомите на водорода са принудени да се държат по-далеч един от друг. Така че едромащабната стабилност на веществото в действителност е следствие от факта, че електроните са ферми-частици.

Разбира се, ако в два атома спиновете на външните им електрони се окажат насочени в противоположни посоки, те могат да се приближат плътно един до друг. Именно така възниква химическата връзка. Оказва се, че два атома, стоящи един до друг, притежават по-малка енергия, ако между тях има електрон. Това е своеобразно електрично притегляне между положителните ядра и електрона между тях. Между двата атома могат да се разположат и два електрона — стига посоките на спиновете им да са противоположни и така възниква най-силната химическа връзка. По-силната връзка не може да съществува, защото принципът на забраната не позволява в пространството между атомите да се разположат повече от два електрона. Счита се, че молекулата на водорода изглежда приблизително така, както е показано на фиг. 2.13.



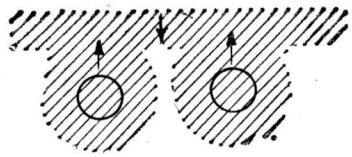
Фиг. 2.13. Молекулата на водорода

Иска ни се да споменем за още едно следствие от принципа на забраната. Вие помните, че ако два електрона в хелиевия атом трябва да се окажат в близост до ядрото, необходимо е техните спинове да имат противоположни посоки. Да допуснем, че искаме да разположим близо един до друг два електрона с еднакви посоки на спиновете им, например, действувайки с фантастично силно магнитно поле, завъртваме спиновете в една посока. Но тогава двата електрона не ще могат да заемат едно и също място в пространството. Единият от електроните ще трябва да заеме друго геометрично положение (фиг. 2.14). По-отдалеченият от ядрото електрон ще притежава по-малка енергия на свързване. Затова и енергията на целия атом ще стане малко по-голяма. С други думи, ако двата електрона имат противоположни спинове, това води до много по-силно взаимно привличане.



Фиг. 2.14. Хелий с един електрон в по-високо енергетично състояние

Така че съществува взаимодействие, стремящо се да разположи спиновете в противоположни посоки, когато електроните се приближават един към друг. Ако два електрона се стремят да попаднат в едно и също място, спиновете им се стремят да се насочат един срещу друг. Силата, която ориентира спиновете в противоположни посоки, е много по-голяма от слабата сила, действуваща между магнитните моменти на двата електрона. Вие сигурно помните, че когато говорихме за феромагнетизма, възникваше загадката защо електроните в различните атоми имат толкова силен стремеж да се подреждат с успоредни спинове. Макар тук още да няма количествено обяснение, можем да приемем следния механизъм за обяснението на това явление: електроните, обкръжаващи един от атомите, взаимодействуват по принципа на забраната с външните електрони, които са се отделили и бродят по кристала. Това взаимодействие заставя спиновете на свободните електрони и на вътрешноатомните електрони да приемат противоположни посоки. Но свободните електрони и вътреш-



Фиг. 2.15. Вероятен механизъм, действуващ във феромагнитен кристал. Спиновете на електроните на проводимостта се подреждат антипаралелно спрямо спиновете на несдвоените вътрешни електрони

ноатомните електрони могат да се наредят така, само ако всички вътрешни електрони на атомите имат еднакво насочени спинове (фиг. 2.15). Изглежда много вероятно, че принципът на забраната, действуващ косвено върху свободните електрони, слага началото на големи построяващи сили, обуславящи феромагнетизма.

Да споменем за още един пример на влияние на принципа на забраната. Вече споменахме, че ядрените сили, действуващи между неутрон и протон, между протон и протон и между неутрон и неутрон, са еднакви. Защо се получава така, че протон и неутрон могат да образуват ядро — ядрото на деутерия, докато ядро само с два протона или два неутрона не съществува? И наистина, деутронът е свързан с енергия около 2,2 MeV, а съответната връзка, която би създала изотоп на хелия с атомно тегло 2, съставено от два протона, не съществува. Комбинация от два протона или от два неутрона не дават свързано състояние.

Обяснението се основава на два ефекта: първо на принципа на забраната, и второ — на факта, че ядрените сили са доста чувствителни към посоката на спина. Силите, действуващи между неутроните и протоните са сили на привличане; те са малко по-големи, когато спиновете са успоредни, и малко по-малки, когато имат противоположни посоки. Оказва се, че разликата между тези сили е достатъчно голяма, така че деутрон може да се образува само в този случай, когато спиновете на неутрона и протона са успоредни, а когато те са противоположно насочени, силите на притегляне не са достатъчни, за да свържат частиците в едно. Понеже спиновете на неутрона и протона всеки е равен на $^1/_2$ и имат еднакви посоки, спинът на неутрона е единица. Ние знаем обаче, че на два протона не е разрешено да бъдат на едно и също място, ако техните спинове са успоредни. Ако не съществуваше принципът на забраната, двата протона биха били свързани. Но понеже те не могат да съществуват на едно и също място, когато спиновете им са успоредни, ядрото на He^2 не може да се образува. Протони с противоположни спинове биха могли да се доближат достатъчно един до друг, но тогава не би им достигнало енергия на свързване за образуване на стабилно ядро, понеже ядрените сили при противоположни спинове са извънредно слаби, за да могат да свържат двойката нуклони. В това, че между неутроните и протоните с противоположни спинове съществуват сили на притегляне, можем да се убедим от опитите по разсейване. Подобни опити между протони с успоредни спинове показват, че и между тях съществуват сили на привличане. Така принципът на забраната ни помага да разберем защо деутерий може да съществува, а He^2 — не.

3

Спин единица

3-1. Филтриране на атоми с помощта на прибора на Щерн — Герлах

В тази глава ще започнем изучаването на квантова механика истински — в смисъл, че описанието на квантово-механичните явления ще се дава изцяло от квантово-механична гледна точка. Няма да търсим обяснения в класическата механика или някаква връзка с нея. Ние искаме да говорим за нови неща на нов език. Частният пример, с който ще започнем, е поведението на квантувания момент на количеството на движение за частици със *спин 1*. Но не искаме да употребяваме такива думи като „момент на количество на движение“ или други понятия от класическата физика и затова за малко ще отложим неговото обсъждане. Избрахме този частен случай само защото той е достатъчно прост, макар и не най-простият от всички. И все пак той е достатъчно сложен, така че да може да служи за образец, който ще обобщим за описването на всички квантово-механични явления. Така че, макар да имаме работа само с частен пример, всички закони, които ще изведем, ще могат незабавно да бъдат обобщени; така и ще направим, за да си изясним общите закони на квантово-механичното описание.

Да започнем с явлението на разцепване на сноп атоми на три отделни потока в опитите на Щерн — Герлах. Вие помните, че ако имате нехомогенно магнитно поле, създавано от магнит с заострен полюс, и ако през такъв прибор пропуснете сноп от частици, той се разцепва на няколко по-тънки снопове; тяхното количество зависи както от вида на атомите, така и от състоянието, в което се намират. Ще разгледаме случая, когато снопът се разцепва на три: ще казваме, че атомите на такъв сноп притежават *спин 1*. Вие можете да измислите и разгледате различни случаи, когато снопът се разделя на повече потоци, например пет, седем или повече, но това не променя същността на нещата.

Да си представим споменатия по-горе прибор на Щерн — Герлах като схематично начертания на фиг. 3.1. Поток атоми (или какви да е частици) е колимиран (ограничен) от някакъв отвор и преминава през нехомогенно поле. Нека потокът се движи по оста y, а магнитното поле и неговия градиент да имат посоката на оста z. Тогава, като гледаме отстрани, ще видим как снопът се разцепва във вертикална посока на три потока. На изходния край на магнита може да се поставят малки броячи, които да броят появяващите се в различните потоци частици. Или можем да спираме двата от тях и да пропускаме по-нататък само третия.

Да предположим, че сме спрели двата долни снопа, а най-горния сме пропуснали през втори прибор на Щерн — Герлах от същия тип (фиг. 3.2). Какво ще стане тогава? Във втория прибор вече *няма да има* ново разцепване на снопа; там ще си остане само най-горния поток (предполагаме, че ъгълът на отклонение е много малък). Ако приемем, че втория прибор е просто продължение на първия, атомите, които са се отклонили веднаж нагоре, ще продължават да се отклоняват нагоре и във втория прибор.

Виждате, че първият прибор е създал сноп от „еднородни“ обекти — атоми, които се отклоняват само нагоре в някакво магнитно поле. Атомите, които постъпват в първия прибор на Щерн — Герлах, са атоми от три „разновидности“ и трите вида избират различни траектории. Като се отфилтрира една единствена разновидност, може да се създаде такъв сноп, чието бъдещо по-

3-1. Филтриране на атоми с помощта на прибора на Щерн — Герлах

3-2. Опити с филтрирани атоми

3-3. Последователно съединяване на филтри на Щерн — Герлах

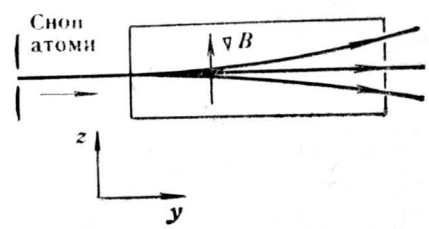
3-4. Базисни състояния

3-5. Интерфериращи амплитуди

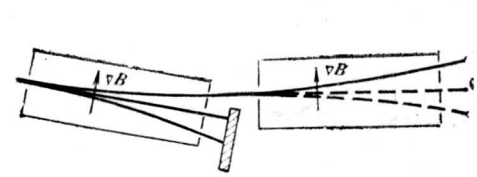
3-6. Механика на квантовата механика

3-7. Преобразуване към друг базис

3-8. Други случаи



Фиг. 3.1. В опита на Щерн—Герлах атомите със спин 1 се разцепват на три снопа

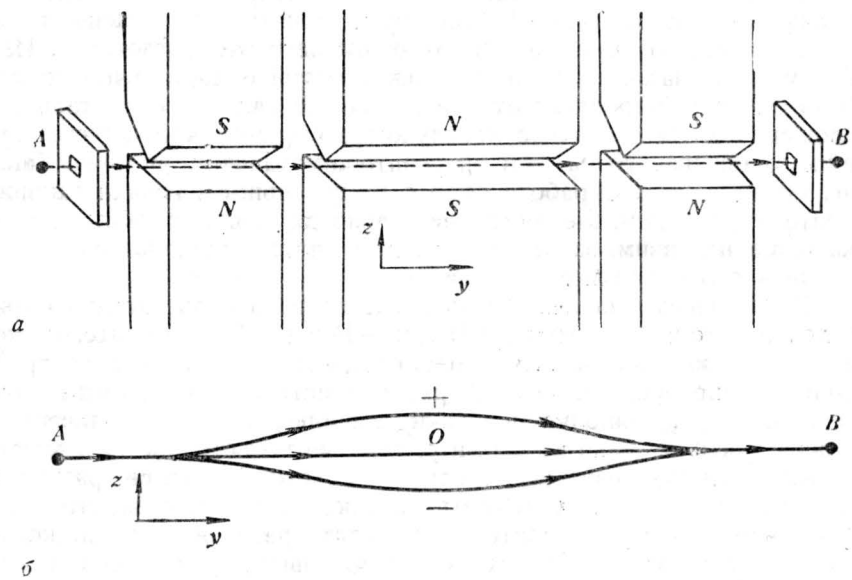


Фиг. 3.2. Атомите от единия от снопове са подложени на действието на друг подобен прибор

ведение в прибор от същия тип е напълно определено. Такъв поток ще наричаме *отфилтриран или поляризиран*: в него всички атоми се намират в *едно и също състояние*.

По-нататък ще бъде удобно да се разглежда малко видоизменен прибор на Щерн – Герлах. На пръв поглед той изглежда сложен, но в действителност опростява всички разсъждения. Впрочем, щом ще правим само „мислени експерименти", усложняването на опита няма да ни струва нито стотинка. (Между другото, никой никога досега не е поставял тези експерименти по описания начин, но въпреки това знаем *как протичат те*. Това знаем от законите на квантовата механика, основани на други подобни експерименти. Тези други опити са трудни за първоначално разбиране и затова предпочитаме някакви идеализирани, но мислени експерименти.)

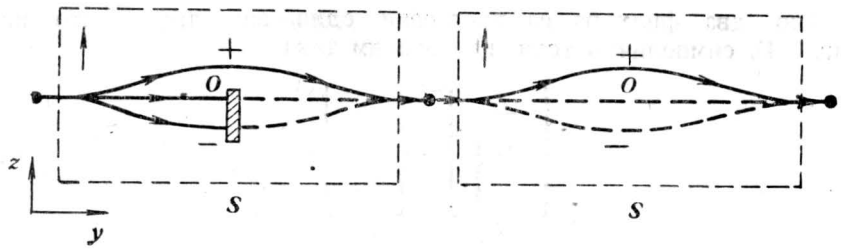
На фиг. 3.3, *а* е показан чертеж на „усъвършенствувания" прибор на Щерн – Герлах, който ще използуваме по-нататък. Той се състои от три последователни магнита с голям градиент на полето. Първият (левият) е обикновеният магнит на Щерн – Герлах



Фиг. 3.3. Въображаемо видоизменение на прибора на Щерн—Герлах (*а*) и пътищата на атоми със спин 1 в него (*б*)

Той разделя падащия сноп от частици със спин 1 на три отделни потока. Вторият магнит има същото сечение, както и първият, но е по-дълъг и с обратна полярност. Вторият магнит отклонява атомните магнитчета в обратна посока и връща тяхната траектория към оста *y*, както това е показано на фиг. 3.3, *б*. Третият магнит е напълно подобен на първия; той събира трите потока отново в една точка и ги пуска през изходния отвор, разположен по оста на прибора. И на края трябва да си представим, че пред входа *A* имаме някакъв механизъм, който извежда частиците от тяхното състояние на покой, и ги ускорява, а друг механизъм след изхода *B* ги забавя до първоначалното състояние на покой. Това е несъществено, но все пак означава, че при нашия анализ не трябва да се грижим за никакви ефекти, предизвикани от движението и можем да съсредоточим вниманието си върху въпросите, свързани само със спина. Предназначението на „усъвършенствувания" прибор на Щерн—Герлах е да доведе всички частици на едно и също място, където те да имат нулева скорост.

Ако сега искаме да проведем опит, подобен на показания на фиг. 3.2, отначало трябва да получим поляризиран сноп, поставяйки в прибора пластинка, която да прегради два снопа (фиг. 3.4). Ако след това пропуснем получения поляризиран сноп атоми през втори такъв прибор, всички атоми ще изберат горния път; в това можем да се убедим, като поставим такива спиращи пластинки в различните потоци от втория прибор.



Фиг. 3.4. „Усъвършенствуван" прибор на Щерн—Герлах, служещ като филтър

Да означим първия прибор с буквата S (ще разглеждаме всевъзможни комбинации на такива прибори и за да не ги объркваме, ще дадем име на всеки един от тях). За всички атоми, които са избрали горния път в S, ще казваме, че се намират в „плюс — състояние спрямо S"; тези от тях, които са минали по средния път — ще наричаме „нула-състояние спрямо S", а тези, които минават по долния път — „минус състояние спрямо S". (На приетия в квантовата механика език бихме казали, че z — компонентата на момента на количеството на движение е равна на $+1\hbar$, 0 и $-1\hbar$ съответно, но засега сме се отказали от този език.) На фиг. 3.4 вторият прибор е ориентиран точно както и първият, така че всички отфилтрирани атоми ще минат по горния път. Ако в първия прибор спрем горния и долен поток и пропуснем само частици, намиращи се в „нула състояние", всички отфилтрирани атоми ще минат и през средния път на втория прибор. И на края, ако заградим в първия прибор двата горни снопа, през втория прибор ще премине само найдолния сноп. Можем да кажем, че първият прибор винаги създава отфилтриран сноп в чисто състояние спрямо S (+, 0 или −) и винаги можем да пробваме кое именно състояние създава той, пропускайки частиците през втори подобен прибор.

И вторият прибор може да се построи така, че и той да пропуска атоми само в определено състояние. За това е необходимо в него да се поставят също такива прегради, както и в първия прибор, и тогава може да се проверява състоянието на падащия поток просто, като се наблюдава какво се получава на изхода. Например, ако се преградят двата долни потока във втория прибор, всички атоми, преминали през първия прибор, ще преминат и през него; ако се прегради горният път, на изхода няма да достигне нищо.

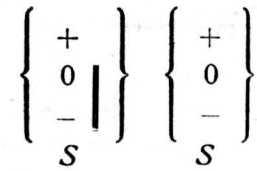
За да облекчим подобни разсъждения, трябва да измислим съкратено изобразяване за нашия „усъвършенствуван" прибор на Щерн — Герлах. Вместо всеки такъв прибор ще поставяме символа

$$\left\{\begin{matrix}+\\0\\-\end{matrix}\right\}_S. \qquad (3.1)$$

(Този символ не ще срещнете никъде другаде в квантовата механика; измислихме го, за да означаваме с него прибора, показан на фиг. 3.3.) Понеже смятаме да използуваме едновременно няколко такива прибора, имащи при това различна ориентация и различни свободни пътища, ще пишем и по една буква отдолу под символа. Така символът 3.1 означава прибора S. Ако в него преградим един или повече потока, ще поставяме вертикална чертичка, показваща кой от сноповете е преграден, например

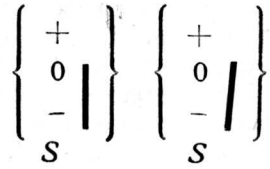
$$\left\{\begin{matrix}+\\0\\-\end{matrix}\right\}_{S\ \ \ \

Ако два филтъра са поставени един зад друг (като на фиг. 3.4), символично това ще означим така



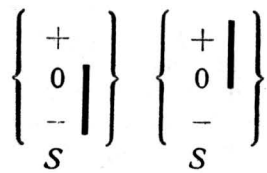
(3.3)

При това разположение всичко, което е минало през първия филтър, ще премине и през втория. Даже да затворим каналите „нула“ и „минус“ на втория прибор, така че да получим



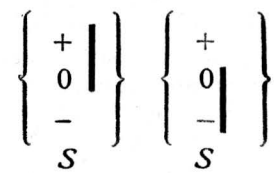
(3.4)

все едно нищо няма да се измени и през втория прибор ще минат всички частици, които са минали и през първия. Но ако имаме



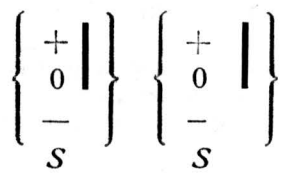
(3.5)

на изхода няма да достигне нито една частица. По същия начин на изхода няма да имаме частици и ако



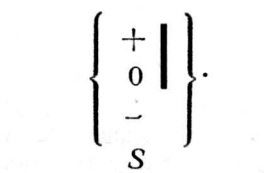
(3.6)

От друга страна



(3.7)

е еквивалентно на



(3.8)

Сега искаме да опишем тези опити квантово-механически. Ще казваме, че атомът се намира в състояние $(+S)$, ако той е преминал през прибора, показан на фиг. 3.5, *б*; че той се намира в състояние $(0S)$, ако е преминал през прибора на фиг. 3.5, *в* и в състояние $(-S)$, ако е преминал през прибора на фиг. 3.5, *г*[1]. Освен това нека $<b\,|\,a>$ бъде *амплитудата* за процеса атом в състояние a, преминавайки през прибора, да се окаже в състояние b. Може да се каже, че $<b\,|\,a>$ е амплитудата за атом от състояние a *да премине* в състояние b. Формула (3.4) означава

[1] Произнася се: „плюс S“ за $(+S)$, „нула S“ за $(0S)$ и „минус S“ за $(-S)$.

$$<+S|+S>=1,$$

а (3.5) —

$$<-S|+S>=0.$$

По същия начин, резултатът (3.6) означава

$$<+S|-S>=0,$$

а (3.7) —

$$<-S|-S>=1.$$

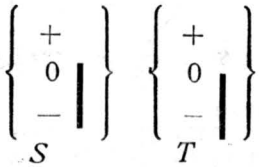
Докато имаме работа само с „чисти“ състояния, т. е. докато откриваме само по един канал в прибора, възможните амплитуди са девет. Те могат да бъдат дадени в следната таблица:

Във \ От	$+S$	$0S$	$-S$
$+S$	1	0	0
$0S$	0	1	0
$-S$	0	0	1

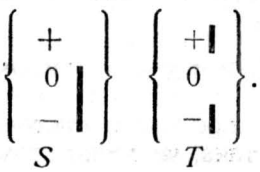
Тази съвкупност от девет числа, наречена *матрица* обхваща изцяло описаните от нас явления.

3-2. Опити с филтрирани атоми

Сега възниква важният въпрос: какво ще стане, ако наклоним втория прибор на някакъв ъгъл, така че оста на неговото поле да не е вече успоредна на оста на полето в първия прибор? Вторият прибор може не само да се накланя, но и да се насочи в друга посока, например така, че снопът да се завърти на 90°. Като начало нека разгледаме такова разположение, при което втория прибор на Щерн—Герлах е завъртян около оста y на ъгъл α (фиг. 3.6). Такъв прибор ще означаваме с буквата T. Нека сега да извършим такъв опит:



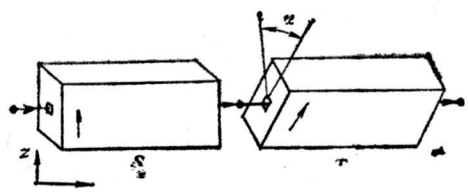
или друг подобен



Какви частици ще се получат на изходите им?

Отговорът е следният. Ако атомите се намират спрямо S в определено състояние, спрямо T те *не се намират* в същото състояние; състоянието $(+S)$ *не е* същевременно и състоянието $(+T)$. Но *съществува* определена *амплитуда* атомът да се намери в състояние $(+T)$ или $(0T)$, или $(-T)$.

С други думи, колкото и да сме убедени, че нашите атоми се намират в определено състояние, фактът си остава факт, че когато такъв атом премине през прибор, наклонен под друг ъгъл, той е принуден, така да се каже, да се „преориентира“ (което, не забравяйте, става по законите на случайностите). Ако във всеки момент пускаме по една частица, въпросът може да се постави единствено така: каква е вероятността частицата да преми-



Фиг. 3.6. Два последователно съединени филтри от типа на Щерн—Герлах. Вторият е завъртян на ъгъл α спрямо първия

не и през двата прибора? Някои атоми, преминали през S, ще попадат в състояние $(+T)$, други — в състояние $(0T)$, трети — в състояние $(-T)$ и на всяко състояние съответствува определена вероятност за преход. Ние можем да изчислим тези вероятности като повдигнем в квадрат модула на комплексните амплитуди за тези преходи; сега ни е необходим математическия метод за намиране на тези амплитуди, тяхното квантовомеханично описание. Трябва да знаем на какво са равни различните величини от типа

$$<-T|S>.$$

Под този израз подразбираме амплитудата за процес, при който атом от състояние $(+S)$ преминава в състояние $(-T)$ (което *не е равно* на нула, освен ако S и T не са успоредни помежду си). Съществуват и други подобни амплитуди, например

$$<+T|0S> \quad \text{или} \quad <0T|-S> \quad \text{и т. н.}$$

Всъщност има девет такива амплитуди — това е също една матрица и теорията трябва да може да ги определи. Както $F=ma$ позволява да изчисляваме какво става при всички обстоятелства с класическа частица, така и законите на квантовата механика позволяват да се определят амплитудите за преминаването на частиците през различни прибори. Основният проблем е как да изчислим за всеки даден ъгъл α или въобще за кой да е ъгъл деветте амплитуди:

$$\begin{array}{lll} <+T|+S>, & <+T|0S>, & <+T|-S>, \\ <0T|+S>, & <0T|0S>, & <0T|-S>, \\ <-T|+S>, & <-T|0S>, & <-T|-S>. \end{array} \tag{3.9}$$

Някои връзки между тези амплитуди можем да напишем веднага. Първо, според нашите определения, квадрата на модула

$$|<+T|+S>|^2$$

дава *вероятността*, атомът от състояние $(+S)$ да премине в състояние $(+T)$. Такива квадратични изрази се пишат в еквивалентният им вид:

$$<+T|+S><+T|+S>^*.$$

В тези означения числото

$$<0T|+S><0T|+S>^*$$

ще определя вероятността частица от състояние $(+S)$ да премине в състояние $(0T)$, а

$$<-T|+S><-T|+S>^*$$

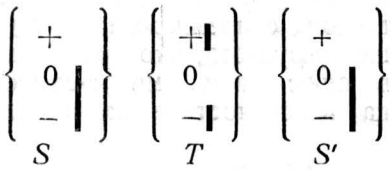
— вероятността тя да премине в състояние $(-T)$. Но нашите прибори са построенн така, че всеки атом, попаднал в прибора T, трябва да премине в *което и да е* едно от трите възможни състояния на прибора T — за атоми от разглеждания вид друга възможност не съществува. Затова сумата от трите току-що написани вероятности трябва да бъде равна на единица. Така получаваме връзката:

$$<+T|+S><+T|+S>^*+<0T|+S><0T|+S>^*+$$
$$+<-T|+S><-T|+S>^*=1. \tag{3.10}$$

Разбира се, ще имаме още две подобни уравнения и за случаите, когато началното състояние е $(0S)$ или $(-S)$. Те могат да бъдат написани много лесно и затова ще преминем към разглеждането на други общи въпроси.

3-3. Последователно съединени филтри на Щерн—Герлах

Нека имаме атоми, поляризирани в състояние $(+S)$, които след това пропускаме през втори филтър, привеждащ ги в състояние, да кажем $(0T)$, а *след това* — през *друг* филтър $(+S)$. (Да го означим с S', за да не го бъркаме с първия филтър S.) Ще си припомнят ли атомите, че вече веднаж са били в състояние $(+S)$? С други думи, поставяме опита

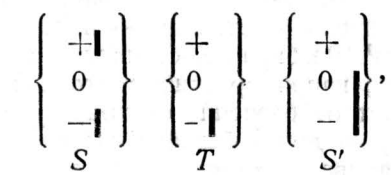


(3.11)

и искаме да знаем дали всички атоми, преминали през T, ще преминат и през S'. *Не.* Веднага след преминаването си през T атомите *ще забравят*, че преди да постъпят в T, те са били състояние $(+S)$. Забележете, че вторият прибор S в (3.11) в ориентиран точно, както и първия, така че той пак е филтър тое типа S; състоянията, филтрирани в S' са същите състояния $(+S)$, $(0S)$ и $(-S)$.

Тук съществено е следното: *ако филтърът T пропуска само един сноп*, преминаващата през втория филтър S *част* от него зависи само от разположението на филтъра T и не зависи от протеклите преди това събития. Фактът, че същите атоми са били веднаж филтрирани от S, никак и по никакъв начин не влияе на това, какво ще правят те след като приборът T ги сортира наново в чист сноп. Оттук следва, че за частиците вероятността да преминат в едно или друго състояние е еднаква независимо от това, какво им се е случило до попадането им в прибора T.

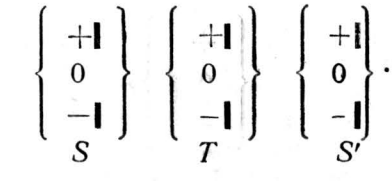
За пример да сравним опита (3.11) с опита



(3.12)

в който е изменен само първият филтър S. Нека ъгълът α (между S и T) да е такъв, че в опита (3.11) една трета от атомите, преминали през T да преминат и през S'. В новия опит (3.12), макар броят на атомите, преминали през T, да е друг, през S' ще премине пак *същата част от тях* — една трета.

Основавайки се на изученото досега, можем наистина да покажем, че частта от атомите, излизащи от T и преминаващи през произволен филтър S', зависи само от T и S', а не от това, което е станало преди. Да сравним опита (3.12) с



(3.13)

В опита (3.12) амплитудата за атом, преминал през S, да премине след това и през T и през S' е равна на

$$<+S\,|\,0T><0T\,|\,0S>.$$

Съответната вероятност е

$$|<+S\,|\,0T><0T\,|\,0S>|^2=|<+S\,|\,0T>|^2|<0T\,|\,0S>|^2.$$

По аналогичен начин в опита (3.13) вероятността е

$$|<0S\,|\,0T><0T\,|\,0S>|^2=|<0S\,|\,0T>|^2\,|<0T\,|\,0S>|^2.$$

Тя хното отношение

$$\frac{|<0S\,|\,0T>|^2}{|<+S\,|\,0T>|^2},$$

зависи само от T и S' и съвсем не зависи от това какъв сноп $(+S)$, $(0S)$ или $(-S)$ е бил отделен в S. (Абсолютните им количества могат да бъдат по-големи или по-малки в зависимост от това каква част от снопа е преминал през T.) Разбира се, бихме получили аналогични резултати, ако сравнявахме вероятностите за преминаване в плюс- или минус-състояние (спрямо S') или отношението на вероятностите за преминаване в нула или минус-състояние.

Но щом като тези отношения зависят само от това какъв сноп може да премине през T, а не от подбора, направен от първия филтър S, ясно е, че същият резултат би се получил и ако последният прибор не е филтър от типа S. Ако за трети филтър (да го назовем R) използуваме прибор, завъртян на произволен ъгъл спрямо T, все едно ще установим, че отношението

$$\frac{|<0R\,|\,0T>|^2}{|<+R\,|\,0T>|^2}$$

не зависи от това какъв сноп е преминал през първия филтър S

3-4. Базисни състояния

Тези резултати илюстрират един от основните принципи на квантовата механика: чрез процес на филтриране всяка атомна система може да бъде разделена на отделни съвкупности, които ще наричаме *базисни състояния* и бъдещото поведение на атомите във всяко от тези базисни състояния зависи само от природата на тези базисни състояния — и не зависи от предисторията на системата[1]. Разбира се, базисните състояния зависят от прилагания филтър; например трите състояния $(+T)$, $(0T)$ и $(-T)$ са една съвкупност от базисни състояния, а трите състояния $(+S)$, $(0S)$ и $(-S)$ — друга базисна система. Възможни са колкото си искаме такива системи и нито една от тях не е по-лоша от останалите.

Трябва да бъдем внимателни, когато твърдим, че разглеждаме добри филтри, които действително създават „чисти“ снопове. Ако например, приборът на Щерн—Герлах разделя достатъчно добре снопoвете един от друг, ние не можем да проведем пълно разделяне на базисните състояния. Ние можем да проверим имаме ли чисти базисни състояния, опитвайки дали повторно прилагане на друг подобен филтър ще разцепи отново снопа. Така например, ако имаме чистото състояние $(+T)$, всички атоми ще преминат през

$$\left\{\begin{array}{c}+\\0\\-\end{array}\right\}_T,$$

но нито един атом няма да премине през

[1] Не смятаме да влагаме в думите „базисно състояние“ нещо повече от казаното тук. Не трябва под „базис“ да се разбира „основа“ и те да се считат за „основни“. Под „базис“ се разбира „система за описване“ в такъв смисъл, както в израза „число в десетичната система“.

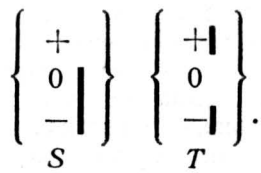


Нашето твърдение за чистотата на базисните състояния означава, че *съществува възможност* да се отфилтрира снопа до такава чистота, че по-нататъшното действие на идентични филтри не води до нови разцепвания в снопа.

Необходимо е още веднъж да отбележим, че всичко, което беше казано досега, е вярно докрай само в идеализирани условия. Във всеки реален прибор на Щерн—Герлах трябва да се помисли и за дифракцията от отворите, която може да принуди някои атоми да преминат в други състояния, за примеси от първични атоми в други възбудени състояния и т. н. Разглеждаме идеализирани случаи и говорим само за тези състояния, които се получават от разцепването на снопа в магнитното поле; при това пренебрегваме всичко, което се отнася до местоположението, импулса, вътрешните възбуждания и други състояния на частиците. Въобще би трябвало да разглеждаме също базисни състояния, сортирани и относно всички тези споменати характеристики, но за простота ще използуваме само нашата съвкупност от три състояния. Това е напълно достатъчно, за да разглеждаме идеализирания случай, в който атомите не изпитват смущаващи влияния в прибора, не се разкъсват и нещо повече, напускайки го, се оказват в състояние на покой.

Забележете, винаги започваме нашите мислени експерименти с това, че вземаме филтър само с един открит канал и така в началото винаги имаме едно определено състояние. Правим това, защото атомите излизат от пещта в различни състояния, случайно определени от това, какво става в пещта. (Това дава тъй наречения „неполяризиран“ сноп.) Тази случайност на състоянията на първичния поток от атоми предполага вероятности от „класически“ тип (като при хвърляне на монета), които се различават от интересуващите ни сега квантовомеханични вероятности. Работата с неполяризирани атоми би ни поставила пред нови усложнения, а по-добре е да ги избегнем, докато все още не сме разбрали поведението на поляризираните снопове. Така че засега няма да се опитваме да разсъждаваме за това, какво би станало, ако *първият* прибор пропускаше повече от един сноп. (В края на главата ще разгледаме как се постъпва при подобни случаи.)

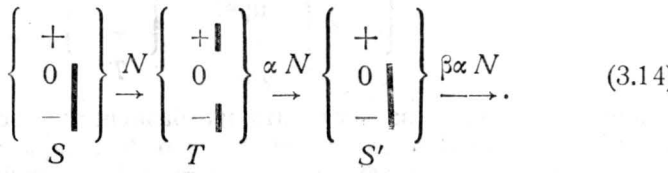
А сега да се върнем назад и разгледаме какво ще стане, ако преминем от базисното състояние на един филтър към базисното състояние на друг филтър. Да започнем пак със случая



Атомите, излизащи от T, се оказват в базисно състояние $(0T)$ и не помнят, че преди това са били в състояния $(+S)$. Някои казват, че при филтрирането с прибора T сме „загубили информацията“ за старото състояние $(+S)$, защото сме „смутили“ атомите, когато сме ги разделяли на три снопа в T. Това не е вярно. Старата информация се губи не при *разделянето* на снопове, а когато се *поставят преградите*. В това можем да се убедим от следната последователност от опити.

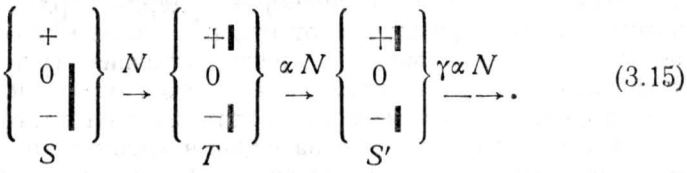
Да започнем с филтъра $(+S)$ и да означим с N количеството преминали през него атоми. Ако поставим след него филтър $(0T)$, броят на атомите, които ще излязат от него, ще бъде някаква част от N, да кажем αN. Ако сега поставим втори фил-

тър ($+S$), до изхода ще достигат само част β от попадащите в него атоми. Всичко това може да се запише по следния начин:



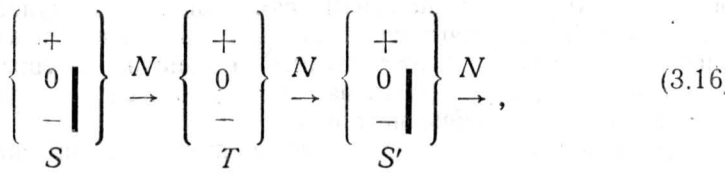
$$\xrightarrow{\beta\alpha N}. \tag{3.14}$$

В случай че нашият трети прибор S' отделя друго състояние, например ($0S$), през него ще премине друга част от потока, например γ[1]. Ще имаме

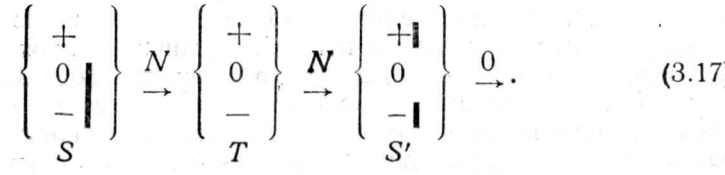


$$\xrightarrow{\gamma\alpha N}. \tag{3.15}$$

Сега нека предположим, че сме повторили двата опита, премахвайки преградите от филтъра T. Тогава ще получим следния забележителен резултат:



$$\xrightarrow{N}, \tag{3.16}$$



$$\xrightarrow{0}. \tag{3.17}$$

В първия случай през S' ще преминат *всички* атоми, докато във втория — *нито един*! Това е един от най-великите закони на квантовата механика. Че природата действува по такъв начин, съвсем не е очевидно; всъщност резултатите, които получихме за нашите идеализирани случаи, отговарят на квантовомеханично поведение, наблюдавано в безкрайно много опити.

3-5. Интерфериращи амплитуди

Как става така, че когато преминаваме от (3.15) към (3.17), т. е. когато *се откриват повече канали*, през филтъра преминават *по-малко* атоми. Това е свързано със старата и дълбока тайна на квантовата механика — интерференцията на амплитудите. С подобен парадокс се срещнахме за пръв път при интерференчния опит, когато електроните преминаваха през два отвора. Вие помните, че и тогава имаше случаи, когато при два открити отвора до детектора достигаха по-малък брой електрони, отколкото при един открит отвор. Количествено това се получава по следния начин. Можем да напишем амплитудата за преминаване на атом през T и S' на прибора (3.17) като сума от три амплитуди — по една за всеки сноп в T; тази сума

$$<0S|+T><+T|+S>+<0S|0T><0T|+S>+ \\ +<0S|-T><-T|+S>=0 \tag{3.18}$$

е равна на нула, макар че нито една от трите амплитуди поотделно не е равна на нула; например квадратът на модула на вто-

[1] На езика на предишните ни означения
$\alpha=|<0T|+S>|^2$, $\beta=|<+S|0T>|^2$, $\gamma=|<0S|0T>|^2$.

рата амплитуда е $\gamma\alpha$ [вж. (3.15)], но *сумата на трите амплитуди е нула.* Същият отговор би се получил и ако S' пропускаше само състоянията $(-S)$. Но при разположение (3.16) отговорът вече е друг. Ако означим амплитудата за преминаване през T и S' с a ще получим[1]

$$a=\langle +S|+T\rangle\langle +T|+S\rangle+\langle +S|0T\rangle\langle 0T|+S\rangle+$$
$$+\langle +S|-T\rangle\langle -T|+S\rangle=1. \qquad (3.19)$$

В опита (3.16) снопът отначало се разцепва, а след това се възстановява. Информацията за първоначалното състояние $+S$ се запазва — всичко изглежда така, като че ли приборът T въобще не е бил там. И това ще бъде вярно за всеки прибор, който поставите на мястото на „отворения изцяло" прибор T. Вместо него можете да поставите филтъра R — под какъвто си искате ъгъл; отговорът винаги ще бъде такъв, като че ли атомите са преминали в S' направо от първия филтър S.

И така достигаме до важен извод: всеки изцяло открит филтър T не предизвиква никакви изменения. Трябва да се добави само едно условие: откритият филтър не трябва да внася никакви смущения, той трябва да пропуска еднакво и трите снопа. Например да няма силно електрично поле в близост до единия сноп, докато до останалите то да е по-слабо. Това условие се налага по следните причини: макар и добавъчното смущение да не е винаги пречка за преминаването на атомите през филтъра, такова смущение може да повлияе и да предизвика изменения във фазите на някои от амплитудите. Тогава интерференцията ще бъде друга и амплитудите (3.18) и (3.19) ще се изменят. Затова винаги ще предполагаме, че добавъчни смущения не съществуват.

Сега да препишем (3.18) и (3.19) в подобрени означения. Нека i да е едно от трите състояния $(+T)$, $(0T)$ и $(-T)$; тогава можем да запишем тези уравнения във вида

$$\sum_{\text{всички } i}\langle 0S|i\rangle\langle i|+S\rangle=0, \qquad (3.20$$

и

$$\sum_{\text{всички } i}\langle +S|i\rangle\langle i|+S\rangle=1. \qquad (3.21)$$

По същия начин в опита, при който S' се заменя с произволен филтър R, имаме

$$\left\{\begin{matrix}+\\0\\-\end{matrix}\right\}_S\quad\left\{\begin{matrix}+\\0\\-\end{matrix}\right\}_T\quad\left\{\begin{matrix}+\\0\\-\end{matrix}\right\}_R. \qquad (3.22)$$

Тогава резултатите винаги ще са такива, каквито биха били, ако приборът T е махнат:

$$\left\{\begin{matrix}+\\0\\-\end{matrix}\right\}_S\quad\left\{\begin{matrix}+\\0\\-\end{matrix}\right\}_R.$$

Записано математически ще имаме:

$$\sum_{\text{всички } i}\langle +R|i\rangle\langle i|+S\rangle=\langle +R|+S\rangle. \qquad (3.23)$$

[1] Оттук не можем да правим извод, че $a=1$, а само, че $|a|^2=1$, така че a може да има и вида $e^{i\delta}$; но може да се покаже, че при $\delta=0$ не се губи нищо съществено.

Това е нашият основен закон и той е верен винаги, когато i означава трите базисни състояния на кой да е филтър.

Забележете, че в опита (3.22) не съществува никаква особена връзка между S, R и T. Нещо повече разсъжденията не зависят от това какви състояния пропускат филтрите. За да напишем уравнението в общ вид, без да се позоваваме на специалните състояния, отбирани от филтрите S и R, нека означим с φ състоянието, пропускано от първия прибор (в нашия пример $+S$), и с χ — състоянието, в което ще излизат атомите от втория филтър) в нашия пример $+R$) Тогава можем да формулираме нашия основен закон (3.23) така:

$$\sum_{\text{всички } i} <\chi | i><i | \varphi> = <\chi | \varphi>, \tag{3.24}$$

където i трябва да пробягва всички базисни състояния на някакъв определен филтър.

Иска ни се още веднаж да подчертаем какво разбираме под „базисни състояния". Те напомнят трите състояния, които можем да отбираме с помощта на един от нашите прибори на Щерн — Герлах. Едното условие е, че ако имаме някакво определено базисно състояние, то бъдещето на процеса не зависи от миналото. Другото условие е, че ако имаме пълна съвкупност от базисни състояния, формула (3.24) остава вярна за всяка съвкупност от начални и крайни състояния φ и χ. Но не съществува никаква *съвкупност от специални* базисни състояния. Започнахме с разглеждането на базисни състояния спрямо прибора T. По същия начин бихме могли да разгледаме *друга съвкупност* от базисни състояния — спрямо S или R и т. н.[1]. Обикновено говорим за базисни състояния „в някакво представяне".

Другото изискване към съвкупностите от базисни състояния (в едно или друго частно представяне) е, че те трябва да се различават напълно едно от друго. Имаме пред вид следното: ако едното състояние е $(+T)$, то амплитудите му за преходи в състоянията $(0T)$ или $(-T)$ трябва да бъдат нули. Ако i и j са две базисни състояния в някакво представяне по общите правила, които вече обсъждахме във връзка с (3.8), се показва, че

$$<j | i> = 0$$

за всички неравни помежду си i и j. Освен това знаем, че

$$<i | i> = 1.$$

Обикновено тези две уравнения се записват във вида:

$$<j | i> = \delta_{ij}, \tag{3.25}$$

където δ_{ij} („символ на Кронекер") е равен по определение на нула при $i \neq j$ и единица при $i = j$.

Уравнение (3.25) не е независимо от останалите закони, за които говорихме. Има случаи, когато не се интересуваме много от математичната задача за намиране на най-малката съвкупност от независими аксиоми, от които всички закони произтичат като следствие. Напълно ни е достатъчно да притежаваме съвкупност от пълна и непротиворечива система от аксиоми. Обаче сега ще покажем, че (3.25) и (3.24) не са независими. Нека φ в (3.24) представлява едно от базисните състояния на същата съвкупност, както и i, да кажем j-тото състояние. Тогава ще имаме:

$$<\chi | j> = \sum_i <\chi | i><i | j>.$$

Но според (3.25) $<i | j>$ е равно на нула, ако $i \neq j$, така че су-

[1] И наистина, за атомни системи с три или повече базисни състояния съществуват други видове филтри (напълно различни от този на Щерн—Герлах), които биха могли да бъдат употребени за отбиране на други съвкупности базисни състояния (при същия им *общ брой*).

мата става $\langle\chi|j\rangle$ — достигаме до тъждество, което показва, че тези два закона не са независими.

Може да се покаже, че ако двете уравнения (3.25) и (3.24), са верни, между амплитудите им съществува още една връзка. Уравнение (3.10) имаше вида:

$$\langle +T|+S\rangle\langle +T|+S\rangle^*+\langle 0T|+S\rangle\langle 0T|+S\rangle^*+$$
$$+\langle -T|+S\rangle\langle -T|+S\rangle^*=1.$$

Ако сега погледнем (3.24) и предположим, че φ и χ представляват състоянието $(+S)$, лявата страна на уравнението става $\langle +S|+S\rangle$; това е равно на единица и получаваме

$$\langle +S|+T\rangle\langle +T|+S\rangle+\langle +S|0T\rangle\langle 0T|+S\rangle+$$
$$+\langle +S|-T\rangle\langle -T|+S\rangle=1.$$

Тези две уравнения са съвместими за всички относителни ориентации на приборите T и S само ако

$$\langle +S|+T\rangle=\langle +T|+S\rangle^*$$
$$\langle +S|0T\rangle=\langle 0T|+S\rangle^*$$
$$\langle +S|-T\rangle=\langle -T|+S\rangle^*.$$

Или написано за произволни състояния φ и χ

$$\langle\varphi|\chi\rangle=\langle\chi|\varphi\rangle^*.$$

Ако не беше това съотношение, вероятностите „нямаше да се запазват“ и частиците „биха се губили“.

Преди да преминем по-нататък нека напишем трите общи закона за амплитудите, т. е. (3.24), (3.25) и (3.26):

I. $$\langle j|i\rangle=\delta_{ji},$$

II. $$\langle\chi|\varphi\rangle=\sum_{\text{всички } i}\langle\chi|i\rangle\langle i|\varphi\rangle,$$

III. $$\langle\varphi|\chi\rangle=\langle\chi|\varphi\rangle^*.$$

В тези уравнения i и j се отнасят за всички базисни състояния на едно дадено представяне, докато φ и χ представят произволни състояния. Важно е да се отбележи, че законът II е верен само тогава, когато сумирането се извършва по всички базисни състояния на системата (в нашия случай те са три: $(+T)$, $(0T)$ и $(-T)$). Тези закони не казват нищо за това, какво трябва да изберем за базисна система. Започнахме с филтъра на Щерн—Герлах при произволна ориентация, но би могла да стане и всяка друга ориентация. Тогава вместо i и j би трябвало да поставим друга съвкупност от базисни състояния и всички закони биха останали в сила. Не съществува никаква специално избрана съвкупност от базисни състояния. Успехът в квантовата механика често се определя от това, дали умеем да използуваме този факт, като не забравяме, че поради него пресмятанията могат да се извършват по различни начини.

3-6. Механика на квантовата механика

Сега ще се опитаме да покажем ползата от изведените по-горе закони. Нека имаме атом в зададено състояние (подразбираме, че е бил подготвен по някакъв начин) и искаме да знаем какво ще стане с него при провеждане на даден опит. С други думи, започваме от състоянието φ на атома и искаме да знаем каква е *вероятността* за преминаването му през прибор, който пропуска атоми само в състояние χ. Законите показват, че можем напълно да опишем прибора чрез трите комплексни числа $\langle\chi|i\rangle$ — амплитудите за преминаване на всяко от базисните

състояния i в състоянието χ. Също така, като пропускаме атомите през прибора, можем да предскажем какво ще стане като описваме състоянието на атомите с трите числа $<i|\varphi>$ — амплитудите за преминаване от своето първоначално състояние в едно от трите базисни състояния. Това е много, много важна идея.

Да разгледаме друга илюстрация, като обсъдим следната задача. Имаме прибора S, след него поставяме някаква сложна конструкция, да я означим с A, и накрая — прибора R:

$$\underset{S}{\left\{\begin{matrix}+\\0\\-\end{matrix}\right\}} \quad \left\{A\right\} \quad \underset{R}{\left\{\begin{matrix}+\\0\\-\end{matrix}\right\}}. \tag{3.28}$$

Нека под A да разбираме всяка сложна комбинация от прибори на Щерн—Герлах — с прегради и полупрегради, под всевъзможни ъгли, с необикновени електрични и магнитни полета — с една дума, става всичко, което може да ви хрумне. (Много е приятно да се поставят мислени експерименти — нямаме никакви грижи, възникващи при *поставянето* на реалните експерименти!) Задачата се състои в следното: с каква амплитуда частица в състояние $(+S)$ и навлизаща в областта A ще излезе оттам в състояние $(0R)$, така че да може да премине през R? За такава амплитуда има стандартно означение

$$<0R\,|\,A\,|\,+S>.$$

Както обикновено то трябва да се чете от ляво на дясно:

$$<\text{Край}\,|\,\text{През}\,|\,\text{Начало}>.$$

Ако случайно се окаже, че A не променя нищо, а представлява открит канал, ще напишем

$$<0R\,|\,1\,|\,+S>=<0R\,|\,+S>; \tag{3.29}$$

тези два символа са равнозначни. В по-общите задачи можем да заменим $(+S)$ с общото начално състояние φ, а $(0R)$ — с общото крайно състояние χ и да търсим амплитудата

$$<\chi\,|\,A\,|\,\varphi>.$$

Пълният анализ на прибора A трябва да дава амплитудата $<\chi\,|\,A\,|\,\varphi>$ за всяка мислима двойка състояния φ и χ, следователно съществуват безкрайно много комбинации! Тогава как можем да дадем кратко описание на поведението на прибора A? Да си представим, че сме видоизменили нашия опит (3.28) така:

$$\underset{S}{\left\{\begin{matrix}+\\0\\-\end{matrix}\right\}} \quad \underset{T}{\left\{\begin{matrix}+\\0\\-\end{matrix}\right\}} \quad \left\{A\right\} \quad \underset{T}{\left\{\begin{matrix}+\\0\\-\end{matrix}\right\}} \quad \underset{S}{\left\{\begin{matrix}+\\0\\-\end{matrix}\right\}}. \tag{3.30}$$

В действителност това не е никакво видоизменение, понеже напълно отворените прибори T не изменят нищо. Но това ни подсказва как да анализираме проблема. Имаме определена съвкупност от амплитуди $<i\,|\,+S>$ за преминаване на атомите от S в състояние i на прибора T. След това имаме друга съвкупност от амплитуди — за преминаване от състояние i (спрямо T) и попадайки в A, да излязат оттам в състояние j (спрямо T). И на края съществува амплитуда всяко състояние j да излезе през последния прибор в състояние $(0R)$. За всеки допустим канал съществува амплитуда от вида

$$<0R\,|\,j><j|\,A\,|\,i><i|\,+S>.$$

Пълната амплитуда можем да получим като сума от такива чле-

нове, комбинирайки всички съчетания на i и j. Търсената от нас амплитуда ще бъде:

$$\sum_{ij} <0R \mid j><j \mid A \mid i><i \mid +S>. \tag{3.31}$$

Ако $(0R)$ и $(+S)$ заменим с общите състояния χ и φ, получаваме израз от същия вид; така че крайният резултат е

$$<\chi \mid A \mid \varphi> = \sum_{ij} <\chi \mid j><j \mid A \mid i><i \mid \varphi>. \tag{3.32}$$

Забележете: дясната част на (3.32) наистина е „по-проста" от лявата. Приборът A е напълно описан от *деветте числа* $<j \mid A \mid i>$, които показват какво е влиянието на A върху трите базисни състояния на прибора T. Знаем ли тези девет числа, можем лесно да се справим с всяка двойка начални и крайни състояния φ и χ, стига само всяко от тях да бъде определено с трите амплитуди за преход във всяко от базисните състояния. Резултатите от опита се предсказват с помощта на уравненията (3.32).

Това е и основният извод на квантовата механика за частици със спин 1. Всяко *състояние* се описва от три числа — амплитудите за пребиваване във всяко от базисните състояния (на избрана съвкупност). Всеки прибор се описва с девет числа — амплитудите за преходи в прибора от едно базисно състояние в друго. Като се знаят тези числа, могат да се пресмятат най-различни ефекти.

Деветте амплитуди, описващи прибора, най-често се представят като квадратна матрица — матрицата $<j \mid A \mid i>$:

В \ От	+	0	−
+	$<+ \mid A \mid +>$	$<+ \mid A \mid 0>$	$<+ \mid A \mid ->$
0	$<0 \mid A \mid +>$	$<0 \mid A \mid 0>$	$<0 \mid A \mid ->$
−	$<- \mid A \mid +>$	$<- \mid A \mid 0>$	$<- \mid A \mid ->$

(3.33)

Цялата математика на квантовата механика представлява разширение на тази идея. Да разгледаме един прост пример. Нека имаме прибора C, който искаме да анализираме, т. е. да пресметнем различните $<j \mid C \mid i>$. Например искаме да знаем какво ще стане при експеримента:

$$\left\{\begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix}\right\}_S \quad \{C\} \quad \left\{\begin{matrix} + \\ 0 \\ - \end{matrix}\right\}_R. \tag{3.34}$$

Но след това забелязваме, че приборът C се състои от две части: поставените един до друг прибори A и B. Отначало частиците преминават през A, а след това — през B, т. е. символично може да запишем

$$\{C\} = \{A\} \,.\, \{B\}, \tag{3.35}$$

така че приборът C може да бъде наречен „произведение" на A и B. Да допуснем, че вече знаем как да анализираме тези две части; тогава можем да определим и матриците A и B спрямо T. Така лесно ще определим $<\chi \mid C \mid \varphi>$ за произволни начални и крайни състояния. Отначало ще напишем:

$$<\chi \mid C \mid \varphi> = \sum_k <\chi \mid B \mid k><k \mid A \mid \varphi>.$$

Разбирате защо, нали? (*Подсказваме*: представете си, че между A и B е поставен прибор T.) Ако сега разгледаме специал-

ния случай, когато φ и χ са също базисни състояния (на прибора T), например i и j, ще получим

$$<j|C|i>=\sum_k <j|B|k><k|A|i>. \qquad (3.36)$$

Това уравнение ще определи матрицата на прибора „произведение“ C, чрез матриците на приборите A и B. Математиците наричат новата матрица $<j|C|i>$, определена с правилото (3.36), матрично произведение BA на двете матрици B и A. (Забележете, че е съществен *редът*, т. е. $AB \neq BA$.) И така можем да кажем, че матрицата за стоящи една до друга части на прибора е матрично произведение от матриците на отделните прибори (като при това *първият* прибор стои в произведението *отдясно*). Всеки, който познава матричната алгебра, разбира, че става дума за уравнение (3.36).

3-7. Преобразуване към друг базис

Ние искаме да направим една заключителна забележка за базисните състояния, използувани в досегашните пресмятания. Да предположим, че искаме да работим в някаква определена базисна система, например S, а друг решава да проведе същите пресмятания в друга базисна система, да речем T.

За по-голяма яснота, нека назовем нашите базисни състояния (iS), където $i=+, 0, -$, а базисните състояния, избрани от нашия познат да наречем (jT). Как да сравним двете пресмятания? Крайните резултати трябва да се окажат еднакви, докато употребяваните в пресмятанията всевъзможни матрици и амплитуди ще бъдат различни.

Каква е връзката между тях? Ако и двамата започнем от едно и също начално състояние φ, ние ще описваме това състояние на езика на трите амплитуди $<iS|\varphi>$ — амплитудите за преходите на φ в базисните състояния S, а нашият колега ще опише φ чрез амплитудите $<jT|\varphi>$ — амплитудите за преходи на φ в базисните състояния в неговото, T, представяне. Как да проверим, че и двамата говорим за едно и също състояние φ? Това можем да направим с помощта на нашето общо правило II [вж. (3.27)]. Като заменим $\varkappa$ с негово произволно състояние jT ще имаме:

$$<jT|\varphi>=\sum_j <jT|iS><iS|\varphi>. \qquad (3.37)$$

За да свържем двете пресмятания, необходимо е да бъдат зададени деветте комплексни числа — матрицата $<jT|iS>$. След това тази матрица може да се използува за привеждане на нашите уравнения във формата, използувана от нашия приятел. Тази матрица показва как да *трансформираме* една съвкупност от базисни състояния в друга. (Поради тази причина понякога наричат $<jT|iS>$ „трансформационна матрица от представяне S към представяне T“).

За случая на частици със спин 1, които имат само три базисни състояния (за частици с по-висш спин те са повече), математическата ситуация напомня това, която имаме във векторната алгебра. Знаем, че всеки вектор може да бъде представен от три числа — компонентите му по трите оси x, y и z. С други думи, всеки вектор може да бъде разложен на три „базисни вектора“, т. е. вектори по тези три оси. Но да предположим, че някой друг е избрал друга тройка оси x', y', z'. За да представи кой да е конкретен вектор, той ще използува други (а не нашите) числа. Тези пресмятания няма да приличат на нашите, но окончателните резултати ще бъдат същите. Вече сме разглеждали такива задачи и знаем правилата за преобразуване на векторите от дадена тройка оси към друга.

Може би вие искате да видите как действуват квантовомеханичните преобразования и сами да се опитате да ги приложите.

Затова сега ще приведем (без да ги извеждаме) матриците за трансформациите на амплитуди за частици със спин 1 от представяне S към друго представяне T при различни взаимни ориентации на филтрите S и T. (В следващите глави ще покажем как се получават тези резултати).

Първи случай. Оста y (по посока на движещата се частица) на прибора S съвпада с оста y на T, но T е завъртян на ъгъл α около тази ос (фиг. 3.6). (За да бъдем точни трябва да посочим, че в прибора T е установена координатна система x', y', z', свързана с координатната система x, y, z на прибора S чрез връзките $z'=z\cos\alpha+x\sin\alpha$; $x'=x\cos\alpha-z\sin\alpha$; $y'=y$.) Тогава амплитудите на трансформацията ще бъдат

$$
\begin{aligned}
&<+T\,|\,+S>=\tfrac{1}{2}(1+\cos\alpha),\\
&<0T\,|\,+S>=-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\alpha,\\
&<-T\,|\,+S>=\tfrac{1}{2}(1-\cos\alpha),\\
&<+T\,|\,0S>=+\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\alpha,\\
&<0T\,|\,0S>=\cos\alpha,\\
&<-T\,|\,0S>=-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\alpha,\\
&<+T\,|\,-S>=\tfrac{1}{2}(1-\cos\alpha),\\
&<0T\,|\,-S>=+\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\alpha,\\
&<-T\,|\,-S>=\tfrac{1}{2}(1+\cos\alpha).
\end{aligned}
\tag{3.38}
$$

Втори случай. Приборът T има същата ос z, както и прибора S, но е завъртян спрямо z на ъгъл β. (Преобразованията на координатите са: $z'=z$; $x'=x\cos\beta+y\sin\beta$; $y'=y\cos\beta-x\sin\beta$). Сега амплитудите на трансформация ще бъдат:

$$
\begin{aligned}
&<+T\,|\,+S>=e^{+i\beta},\\
&<0T\,|\,0S>=1,\\
&<-T\,|\,-S>=e^{-i\beta},
\end{aligned}
\tag{3.39}
$$

като всички останали са равни на нула.

Обърнете внимание, че произволни въртения на T могат да се представят чрез две въртения.

Ако състоянията φ се определят от трите числа

$$C_+=<+S\,|\,\varphi>,\quad C_0=<0S\,|\,\varphi>,\quad C_-=<-S\,|\,\varphi> \tag{3.40}$$

и ако същите състояния се описват от гледна точка на T от други три числа

$$C'_+=<+T\,|\,\varphi>,\quad C'_0=<0T\,|\,\varphi>,\quad C'_-=<-T\,|\,\varphi>, \tag{3.41}$$

тогава коефициентите $<jT\,|\,iS>$ от (3.38) и (3.39) ще дават преобразованията, свързващи C_i и C'_i. С други думи, числата C_i приличат много на компонентите на вектор, които от гледна точка на S и T изглеждат различно.

Такава тясна аналогия с векторите съществува *само* за частици със спин 1 (понеже за тяхното представяне са необходими три амплитуди). За тях при всички случаи съществуват тройка числа, които при изменение на координатите се преобразуват по напълно определен начин. И действително тук имаме и такава съвкупност от базисни състояния, които се *трансформират точно както и трите компоненти на вектор*. Трите комбинации:

$$C_x = -\frac{1}{\sqrt{2}}(C_+ - C_-), \quad C_y = -\frac{i}{\sqrt{2}}(C_+ + C_-), \quad C_z = C_0 \qquad (3.42)$$

се трансформират в C'_x, C'_y и C'_z, така както и x, y и z се трансформират в x', y' и z'. (Това можете да проверите с помощта на формулите (3.38) и (3.39).) Сега вече можете да разберете защо частиците със спин 1 често се наричат „векторни частици".

3-8. Други случаи

Вече подчертахме, че тези разсъждения и изводи за частици със спин 1 служат само като пример за всякакви други квантовомеханични задачи. Необходимо е само да се обобщи броят на основните състояния. Вместо три базисни състояния, в други случаи могат да бъдат необходими n базисни състояния[1]. Формата на основните закони (3.27) ще остане същата, като само трябва да помним, че i и j пробягват всички n базисни състояния. Може да се използува всяка подходяща система базисни състояния и всеки има право да избере тази, която му харесва: връзката между всяка такава двойка базисни системи се осъществява чрез матрица на преобразование с размерност $n \times n$. Понататък ще разгледаме тези преобразования подробно.

И на края обещахме да разгледаме случая, когато атомите от източника попадат направо в прибора A, и след това се анализират от филтър, който избира състоянието χ. Вие не знаете какво е състоянието φ, в което атомите влизат в прибора. Навярно по-добре би било сега да не се захващаме с такава задача, а да разглеждаме случаи, когато в началото имаме чисти състояния, но ако настоявате, ще ви покажа как се справят с тази задача.

Преди всичко трябва да сте в състояние да направите разумни предположения за разпределенията на състоянията между атомите в неполяризирания първичен сноп. Например, ако в източника няма нещо „специално", разумно ще бъде да предположим, че атомите имат „случайна" ориентация. Квантовомеханично това съответствува на твърдението, че за състоянията не знаем нищо повече, освен че една трета от атомите са в състояние $(+S)$, една трета — в $(0S)$ и останалите — в $(-S)$. За атомите от състояние $(+S)$ амплитудата за преминаване през A ще бъде $\langle\chi|A|+S\rangle$, а вероятността — $|\langle\chi|A|+S\rangle|^2$. Същото се отнася и за другите състояния. Така общата вероятност ще бъде:

$$\frac{1}{3}|\langle\chi|A|+S\rangle|^2 + \frac{1}{3}|\langle\chi|A|0S\rangle|^2 + \frac{1}{3}|\langle\chi|A|-S\rangle|^2.$$

Но защо използувахме S, а не T или някое друго представяне? Колкото и странно да изглежда, отговорът на изследвания от нас проблем не зависи от изходното разлагане; то е едно и също за всички случайни ориентации на атомите. По такъв начин се получава:

$$\sum_i |\langle\chi|iS\rangle|^2 = \sum_j |\langle\chi|jT\rangle|^2$$

за всяко χ. (Докажете това сами!).

Обърнете внимание: *неправилно* е да се казва, че началните състояния притежават амплитуда $\sqrt{1/3}$ да бъдат в състояние $(+S)$, $\sqrt{1/3}$ — в състояние $(0S)$ и $\sqrt{1/3}$ — в състояние $(-S)$. Ако това беше така, щяха да бъдат възможни някакви интерференции. Вие просто *не знаете* какво е началното състояние и сте задължени да мислите на езика на вероятностите: допускате, че отначало атомите се намират в произволни състояния и след това усреднявате по всички възможности.

[1] Броят на базисните състояния n може да се окаже (и обикновено е) равен на безкрайност.

4

Спин една втора[1]

4-1. Трансформация на амплитудите

4-1. Трансформация на амплитудите

4-2. Трансформация при преминаване към завъртяна координатна система

4-3. Въртения около оста z

4-4. Въртения на 180° и на 90° около оста y

4-5. Въртения около оста x

4-6. Произволни въртения

В предишната глава, използувайки за пример система със спин 1, нахвърлихме общите принципи на квантовата механика. Всяко състояние ψ може да се опише чрез съвкупност от базисни състояния, задавайки амплитудите за пребиваване във всяко от тях.

Амплитудата за преход от едно състояние в друго в общия случай може да се запише като сума от произведенията на амплитудите за преход в едно от базисните състояния с амплитудата за преход от тези базисни състояния в крайното състояние; в сумата непременно влизат членове, отнасящи се до всяко от базисните състояния

$$\langle\chi|\psi\rangle=\sum_i\langle\chi|i\rangle\langle i|\psi\rangle. \tag{4.1}$$

Базисните състояния са ортогонални едно на друго — амплитудата за преминаване в едно от тях, ако вече се намира в друго от същата базисна система, е нула:

$$\langle i|j\rangle=\delta_{ij}. \tag{4.2}$$

Амплитудата за преход от едно състояние в друго е комплексно спрегната на амплитудата за обратния преход:

$$\langle\chi|\psi\rangle^*=\langle\psi|\chi\rangle. \tag{4.3}$$

Споменахме също, че базисът за състоянието може да не е единствен и с помощта на формула (4.1) може да се премине от един базис към друг. Нека например да знаем амплитудите $\langle iS|\psi\rangle$ за намиране на състоянието ψ във всяко от базисните състояния i на базисната система S, но след това решаваме, че е по-добре, ако опишем системата в термините на друга съвкупност от базисни състояния — например състояние j, принадлежащо на базиса T. Тогава във формула (4.1) вместо jT можем да поставим χ и ще получим:

$$\langle jT|\psi\rangle=\sum_i\langle jT|iS\rangle\langle iS|\psi\rangle. \tag{4.4}$$

Амплитудите за намиране на състоянието (ψ) в базисните състояния (jT) са свързани с амплитудите за тяхното намиране в базисните състояния (iS) чрез съвкупността от коефициенти $\langle jT|iS\rangle$. Ако базисните състояния са N, коефициентите ще бъдат N^2. Често тази съвкупност от коефициенти се нарича „*матрица на трансформацията от представянето S в представянето T*“. Математически това изглежда страшновато, но е достатъчно да означим нещата по друг начин и се оказва, че няма нищо страшно. Ако означим с C_i амплитудата за това, състоянията ψ да се намират в базисното състояние (iS), т. е. $C_i=\langle iS|\psi\rangle$, а с C'_j — съответните амплитуди за базисната система T, т. е. $C'_j=\langle jT|\psi\rangle$, (4.4) може да се запише така:

[1] Тази глава не е нищо повече от едно дълго и абстрактно отклонение от основната линия на досегашното изложение; в нея няма никакви нови идеи, които биха се появили по друг път в някоя от следващите глави. Затова можете спокойно да я пропуснете, а по-нататък, ако ви интересува, да се върнете отново към нея.

$$C'_j = \sum_i R_{ji} C_i \,. \qquad (4.5)$$

където R_{ji} е еквивалентно на $<jT|iS>$. Всяка амплитуда C'_j е сума по *всички* i-та от произведенията на елементите от даден ред j на R_{ji}, умножени по всички амплитуди C_i. Това вече прилича на трансформация на вектори от една координатна система в друга.

Но да не се увличаме излишно по абстрактни разсъждения. Вече дадохме два примера с тези коефициенти за случаи със спин 1 и вие знаете как да ги използувате практически. От друга страна обаче квантовата механика притежава едно много красиво качество: поради факта, че състоянията са само три, като използуваме само свойствата на симетрия на пространството спрямо въртения, можем по чисто абстрактен път да изчислим тези коефициенти. Да направим тези разсъждения на толкова ранен стадий не би било много добре: преди да стъпите на „суха земя" вие бихте могли да потънете отново в море от абстракции. Но всичко това е така красиво, че непременно ще проведем тези пресмятания, когато му дойде времето.

В тази глава ще покажем как може да се получат коефициентите на трансформацията за частици със спин $^1/_2$. Избрахме този случай, защото той е по-прост от случая на частици със спин 1. Задачата е да се определят коефициентите R_{ji} за частици или атомни системи, които в прибора на Щерн—Герлах се разцепват на два снопа. Ще изведем всички коефициенти на преобразование от едно представяне в друго чрез чисти разсъждения, плюс няколко предположения. *Някакви* предположения винаги са необходими, за да можем след това да използуваме само „чисти" разсъждения! Въпреки че нашите доказателства ще бъдат абстрактни и малко объркани, полученият резултат може лесно да се формулира и разбере. Освен това изводът ще бъде много важен. Ако искате, можете да разглеждате всичко това като „културно мероприятие". Защото вече се условихме, че всичко съществено, което се получи тук, ще бъде изведено при необходимост в следващите глави по друг начин. Така че не се безпокойте, че ще загубите нишката на изложението на квантовата механика, ако напълно пропуснете тази глава или я изучите по-късно. Мероприятието е „културно" в смисъл, че то трябва да ви покаже, че принципите на квантовата механика са не само интересни, но и толкова дълбоки, че като прибавим към тях всичко няколко хипотези за структурата на пространството, можем да получим много свойства за физичните системи. Освен това важно е да се разбере откъде произтичат различните следствия на квантовата механика. Докато нашите закони на физиката са непълни (а така е и в действителност), винаги е интересно да се изясни къде нашите теории престават да се потвърждават от опита — там ли, където нашата логика е най-добра или там, където тя е най-слаба. Досега се е оказвало, че там, където нашата логика е най-абстрактна, тя винаги дава най-правилните резултати — теорията се съгласува напълно с опита. Само когато се опитваме да строим конкретни модели за вътрешния строеж на елементарните частици и тяхното взаимодействие, не сме в състояние да намерим теория, която да се съгласува с експеримента. Теорията, която ще опишем тук, се съгласува с опита навсякъде, където е била проверявана; тя е еднакво добра, както за електрони и протони, така и за странните частици и т. н.

Още една неприятна (но важна) забележка: невъзможно е еднозначно да определим коефициентите R_{ji}, защото в амплитудите за вероятностите винаги съществува някакъв произвол. Ако имаме ред амплитуди, например амплитудите за преход в някаква точка по много различни начини, и ако умножим всяка от тези амплитуди с един и същ фазов множител, например $e^{i\delta}$, ще се получи друга съвкупност, която с нищо не е по-лоша от първоначалната. Следователно винаги може да изменяте произволно фа-

зите на всички амплитуди във всяка задача, ако поискате.

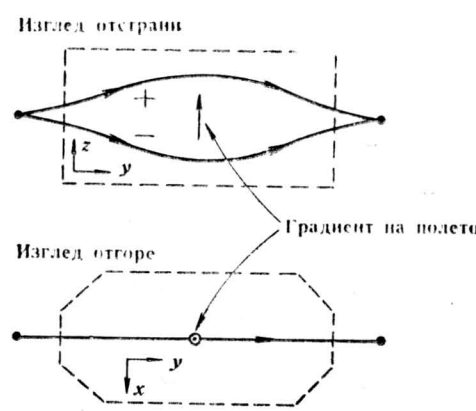
Да допуснем, че изчислявате някаква вероятност, вземайки сумата от няколко амплитуди, например $(A+B+C+\ldots)$ и повдигате модула на тази сума на квадрат. След това някой друг изчислява същото, сумира амплитудите $(A'+B'+C'+\ldots)$ и пак повдига модула на квадрат. Ако всички амплитуди A', B', C' и т. н. се различават от A, B, C и т. н. само с експонентата $e^{i\delta}$, всички вероятности, получавани чрез повдигане на модула на квадрат ще се окажат еднакви, защото тогава $(A'+B'+C'+\ldots)= =e^{i\delta}(A+B+C+\ldots)$. Или да допуснем, че сме пресмятали нещо по уравнение (4.1), но след това внезапно сме изменили всички фази на дадена базисна система. Тогава всяка от амплитудите $\langle i|\psi\rangle$ би трябвало да се умножи с един и същ множител $e^{i\delta}$. По същия начин, с $e^{i\delta}$ биха се изменили и всички амплитуди $\langle i|\chi\rangle$, но амплитудите $\langle\chi|i\rangle$ са комплексно спрегнати на амплитудите $\langle i|\chi\rangle$; по такъв начин и те ще придобият множителя $e^{i\delta}$. Плюс и минус $i\delta$ в експонентите ще се унищожат и пак ще се получи първоначалното уравнение. Така че общото правило е: изменението на всички амплитуди с една и съща фаза спрямо дадена базисна система и даже просто изменение на *всички* амплитуди с произволна фаза в каквато и да е задача не изменя с нищо нещата. Следователно съществува някаква свобода при избора на фазите в трансформационната матрица. Често ще прибягваме до такъв произволен избор, което е в съгласие с общоприетото споразумение.

4-2. Трансформации при преминаване към завъртяна координатна система

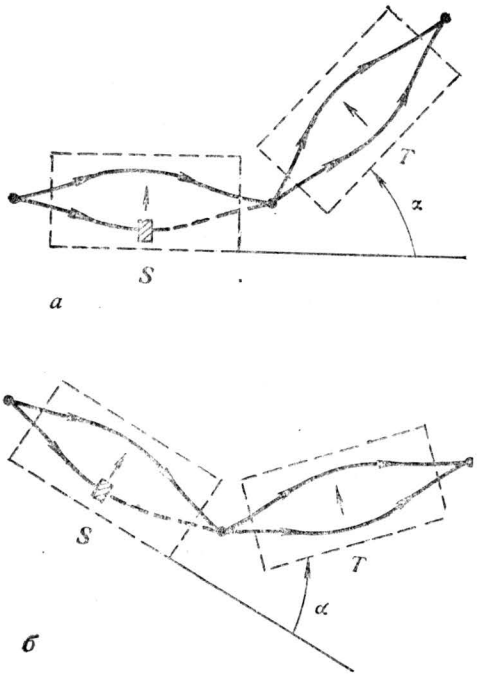
Нека пак разгледаме „усъвършенствувания" прибор на Щерн—Герлах, описан в предишната глава. Поток частици със спин $^1/_2$ навлиза в прибора отляво и се разцепва, изобщо казано, на *два* снопа, както това е показано схематично на фиг. 4.1. (При спин 1 сноповете са три.) Както и по-рано, към края на прибора сноповете отново ще се слеят, ако по пътя на единия не поставим „преграда", която да го погълне на половината път. На фигурата има стрелка, която показва посоката на нарастване на интензитета на полето, например стрелката указва положението на магнитния полюс с остър край. Нека за нашия прибор тази стрелка е *насочена нагоре*. Във всеки подобен прибор нейното положение е фиксирано и това позволява да се покаже взаимната ориентация при комбинация от няколко такива прибора. Накрая ще предположим, че посоката на магнитното поле спрямо стрелката във всички магнити е еднаква.

Ще казваме, че атомите от „горния" сноп се намират в състояние $(+)$ *спрямо дадения прибор*, а атомите от „долния" сноп — в състояние $(-)$. (Нулево състояние за частици със спин $^1/_2$ не съществува.)

Сега да предположим, че сме поставили два такива усъвършенствувани прибора на Щерн—Герлах един след друг (фиг. 4.2, *а*). Да означим първия от тях с S. Преграждайки единия или другия сноп в него, можем да „изготвяме" чистите състояния $(+S)$ или $(-S)$. [На фигурата се приготвя чисто състояние $(+S)$.] При всяко разположение на преградите винаги съществува някаква амплитуда за това, че частица, излизаща от S, се оказва в снопа $(+T)$ или $(-T)$ на втория прибор. Съществуват четири такива амплитуди: за преход от $(+S)$ в $(+T)$, от $(+S)$ в $(-T)$, от $(-S)$ в $(+T)$ и от $(-S)$ в $(-T)$. Тези амплитуди са просто четирите коефициента на трансформационната матрица R_{ji} за преход от представянето S към представянето T. Може да се счита, че първият прибор „изготвя" определено състояние в едно представяне, а втория прибор „анализира" това състояние в термините на второто представяне. Бихме искали да се научим да отговаряме на такива въпроси: ако, загражданки един от сноповете в S, ние сме приготвили атома в дадено състояние, на-



Фиг. 4.1. „Усъвършенствуван" прибор на Щерн—Герлах със снопове от частици със спин $^1/_2$



Фиг. 4.2. Два еквивалентни опита

пример ($S+$), то какво ще бъде изменението, което той ще изпита, когато преминава през прибора T, настроен на състояние ($-T$)? Разбира се, резултатите ще зависят от ъгъла между системите S и T.

Трябва да обясним защо има надежда теоретично да определим коефициентите R_{ji}. Почти е невъзможно да се повярва, че ако спиновете на частиците са били подредени в посоката $+z$, то съществува някаква възможност да се установи, че някои частици имат спинове, насочени по $+x$ или в някаква друга посока. Това наистина е *почти* невъзможно. Но все пак, не съвсем. Остава *само един начин* това да се осъществи, а когато пътят е единствен, той може да бъде намерен.

Можем да разсъждаваме така: да предположим, че приборите са разположени, както е показано на фиг. 4.2, *а*: прибор T е поставен под ъгъл α спрямо S. Нека S пропуска само снопа ($+$), а T — само снопа ($-$). Измерили сме някаква вероятност за това частиците, излизащи от S да преминават през T. Сега да предположим, че правим измерване с приборите, показани на фиг. 4.2, *б*. *Относителната* ориентация на S и T е същата, но цялата система е разположена в пространството под друг ъгъл. Ще предположим, че и двата опита водят до една и съща вероятност за преминаването на частиците от чистото състояние относно S в другото чисто състояние относно T. С други думи предполагаме, че резултатът от всеки подобен опит е еднакъв, че самата *физика* остава същата, както и да е ориентиран в пространството *целия* прибор. (Вие ще кажете: „Това е „очевидно“. Но *все пак* това е само предположение и то е „вярно“, ако наистина се изпълнява.) Горното предположение означава, че коефициентите R_{ji} зависят само от взаимното разположение на приборите S и T в пространството, а не от абсолютното им разположение. С други думи R_{ji} зависи само от *въртенето*, което довежда S в T, защото общото за фигурите 4.2, *а* и *б*, очевидно, е тримерното въртене, което привежда S в положението на T. Когато трансформационната матрица R_{ji} зависи, както в нашия случай, само от въртене, тя се нарича *матрица на въртене*.

За да направим следващата крачка, необходима е още малко информация. Нека сме добавили трети прибор (да го означим U), поставен след T и под известен ъгъл спрямо него (фиг. 4.3, *а*). (Всичко това изглежда вече прекалено, но в това се крие и прелестта на отвлеченото мислене: възможност да се поставят и най-невероятните експерименти, начертавайки само няколко нови линии!) Какво представлява сега трансформацията $S \to T \to U$? Фактически нас ни интересува амплитудата за прехода от някакво състояние спрямо S към друго състояние спрямо U, ако са известни трансформациите от S към T и от T към U. Нека отначало разгледаме опит, в който всички канали на T са открити. Отговорът се получава чрез двукратно прилагане на (4.5). За прехода от S-представяне към T-представяне ще имаме:

$$C'_j = \sum_i R^{TS}_{ji} C_i \,, \tag{4.6}$$

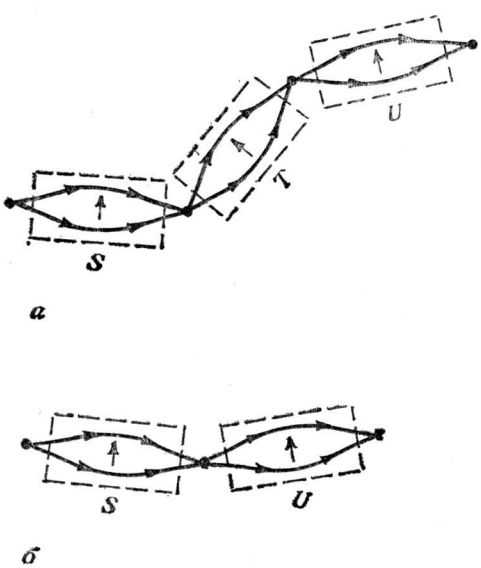
където горните индекси TS са необходими, за да различим това R от R^{UT}, когато ще преминаваме от T към U.

Като означим амплитудата за появяване на атомите в базисните състояния на представянето U с C''_k, можем да ги свържем с T-амплитудите, прилагайки още веднъж (4.5):

$$C''_k = \sum_j R^{UT}_{kj} C'_j \,. \tag{4.7}$$

Сега от (4.6) и (4.7) можем да получим трансформацията направо в U. Като заместим C'_j от (4.6) в (4.7), ще имаме:

$$C''_k = \sum_j R^{UT}_{kj} \sum_i R^{TS}_{ji} C_i \,. \tag{4.8}$$



Фиг. 4.3. Ако T е „отворен до край“, то δ е еквивалентно на α

И понеже в R^{UT}_{kj} липсва индексът i, можем да изнесем напред сумирането по i и да напишем:

$$C''_k = \sum_i \sum_j R^{UT}_{kj} R^{TS}_{ji} C_i \,. \tag{4.9}$$

Това е формулата за двойната трансформация.

Забележете, че докато сноповете в T не се прегражда, състоянията на неговия изход са същите, както и на неговия вход. Бихме могли с еднакъв успех да преминем от S-представянето направо в представянето U. Това означава, че приборът U е поставен непосредствено след S, както това е показано на фиг. 4.3,*б*. В този случай бихме написали:

$$C''_k = \sum_i R^{US}_{ki} C_i \,, \tag{4.10}$$

където R^{US}_{ki} са коефициентите за тази трансформация. Ясно е обаче, че (4.9) и (4.10) трябва да водят към еднакви амплитуди C''_k, независимо от началните състояния φ. Следователно трябва да имаме

$$R^{US}_{ki} = \sum_j R^{UT}_{kj} R^{TS}_{ji} . \tag{4.11}$$

С други думи за всяко въртене $S \to U$, ако го разглеждаме като две последователни въртения $S \to T$ и $T \to U$, матрицата на въртене R^{US}_{ki} може да се получи от матрицата на двете частни въртения с помощта на формулата (4.11). Ако искате да знаете, (4.11) следва направо от (4.1) и представлява само друго записване на формулата

$$\langle kU \mid iS \rangle = \sum_j \langle kU \mid jT \rangle \langle jT \mid iS \rangle .$$

● ● ●

За пълнота нека добавим още следното. Но не мислете, че това ще бъде нещо много важно; ако желаете, можете да преминете направо към следващия параграф. Трябва да признаем, че това, което сме казали, не е съвсем вярно. В действителност, не можем да твърдим, че (4.9) и (4.10) трябва да водят към абсолютно еднакви амплитуди. Еднакви трябва да бъдат само физичните резултати; самите амплитуди могат да се различават с общ фазов множител от вида $e^{i\delta}$, който не изменя резултатите от пресмятанията, свързани с реалната действителност. С други думи, вместо (4.11) единственото, което можем да твърдим е, че

$$e^{i\delta} R^{US}_{ki} = \sum_j R^{UT}_{kj} R^{TS}_{ji} , \tag{4.12}$$

където δ е някаква реална константа. Смисълът на този добавъчен множител $e^{i\delta}$ е, че амплитудите, които получаваме, използувайки матриците R^{US}, могат да се различават с една и съща фаза ($e^{-i\delta}$) от амплитудите, които бихме получили след две последователни въртения R^{UT} и R^{TS}. Но вече знаем, че ако всички амплитуди се изменят с еднаква фаза, това няма да окаже влияние върху нищо. Така че при желание можем направо да пренебрегнем този множител. Оказва се обаче, че ако определим нашата матрица на въртене по особен начин, този фазов множител може изобщо да не се появи: δ в (4.12) винаги ще бъде нула. Въпреки че това няма да се отрази върху нашите по-нататъшни разглеждания, ще докажем това, като използуваме математическата теорема за детерминантите. (Ако сте слабо запознати с теорията на детерминантите, няма защо да следите доказателството, а направо преминете към определението (4.15).)

Първо трябва да напомним, че (4.11) е математическо опреде-

ление на „произведение“ на две матрици. (Удобно е да се казва „R^{US} е произведение на R^{UT} и R^{TS}“.) Второ, съществува математическа теорема (която за използуваните тук матрици 2×2 вие лесно можете да докажете), която твърди, че детерминантата на „произведението“ на две матрици е произведение от техните детерминанти. Прилагайки тази теорема към (4.12), получаваме:

$$e^{i2\delta}(\mathrm{Det}\ R^{US})=(\mathrm{Det}\ R^{UT})\,(\mathrm{Det}\ R^{TS}). \tag{4.13}$$

(Изпускаме долните индекси, понеже сега те не ни трябват). Да, отляво стои 2δ! Спомнете си, че имаме работа с матрици 2×2; всеки член в матрицата R^{US}_{ki} е умножен с $e^{i\delta}$, а всеки член в детерминантата (състоящ се от два множителя) се получава чрез умножаване с $e^{i2\delta}$. Да извлечем квадратен корен от (4.13) и да разделим (4.12) с него:

$$\frac{R^{US}_{ki}}{\sqrt{\mathrm{Det}\ R^{US}}}=\sum_i \frac{R^{UT}_{kj}}{\sqrt{\mathrm{Det}\ R^{UT}}}\cdot\frac{R^{TS}_{ji}}{\sqrt{\mathrm{Det}\ R^{TS}}}. \tag{4.14}$$

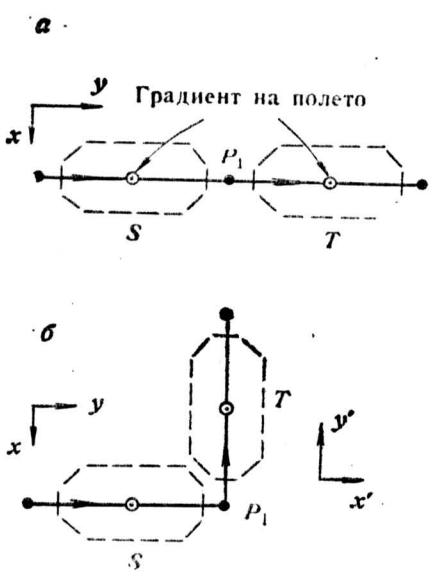
Така изчезва добавъчния фазов множител.

По-нататък се оказва, че ако искаме всички наши амплитуди във всяко зададено представяне да са нормирани (а това, както помните, означава, че $\sum_i \langle\varphi|i\rangle\langle i|\varphi\rangle=1$), то детерминантите на всички матрици на въртене ще бъдат имагинерни експоненти от вида $e^{i\alpha}$. (Сега няма да доказваме това; след време вие сами ще се убедите, че то винаги е изпълнено.) Следователно, като положим $\mathrm{Det}\ R=1$, можем да избираме всички наши матрици на въртене R така, че фазите им да се получават еднозначни. Това можем да постигнем по следния начин. Нека с някакъв метод сме определили матриците на въртене R. Да приемем

$$R_{\text{станд.}}=\frac{R}{\sqrt{\mathrm{Det}\ R}}. \tag{4.15}$$

като правило за „привеждане“ на R към „стандартна форма“. За да получим еднозначни фази, трябва да умножим всеки член в R с един и същ фазов множител. По-нататък винаги ще предполагаме, че нашите матрици са приведени в „стандартна форма“; тогава можем да използуваме направо формулите (4.11) без никакви добавъчни фазови множители.

4-3. Въртения около оста z



Фиг. 4.4. Въртене на 90° около оста z

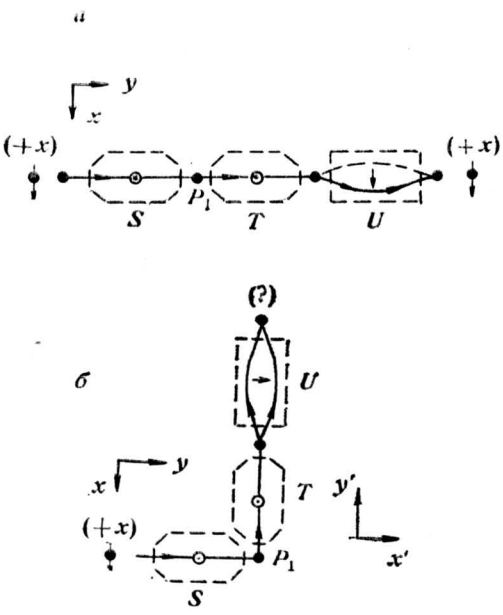
Сега вече сме готови да определим трансформационната матрица R_{ji}, свързваща две различни представяния. Въоръжени с правилото за обединяване на въртенията и предположението, че в пространството няма избрани направления, вече притежаваме ключа за намиране на матрицата за произволни въртения. При това решението е *единствено*. Да започнем с трансформации, които отговарят на въртения около оста z. Нека имаме два прибора S и T, поставени един след друг по права линия; на фиг. 4.4, *а* техните оси са успоредни и насочени към нас. (Тази посока ще приемем за посока на оста z.) Ясно е, че ако снопът в прибора S е насочен нагоре (по $+z$), то и в прибора T той ще има същата посока. Сега да положим, че приборът T е завъртян на някакъв ъгъл, но оста му пак остава успоредна на оста на другия прибор S (фиг. 4.4, *б*). Интуитивно ни се струва, че снопът $(+)$ в S както и по-рано ще преминава в снопа $(+)$ на T, понеже както полетата, така и градиентите им се характеризират с еднакви физични посоки. И това е напълно правилно. По същия начин снопът $(-)$ в S ще преминава в снопа $(-)$ на T. Този резултат е валиден за всяка ориентация на прибора T в равнината xy на прибора S. Какво следва от всичко това за връзката между $C'_+=\langle+T|\psi\rangle$, $C'_-=\langle-T|\psi\rangle$, $C_+=\langle+S|\psi\rangle$ и $C_-=\langle-S|\psi\rangle$? Може да се помисли, че всяко въртене около оста z на

„отправната система“ на базисните състояния оставя амплитудите $C_{\pm}$ за пребиваване в състояния „нагоре“ и „надолу“ същите както и по-рано и затова имаме право да пишем $C'_{+}=C_{+}$ и $C'_{-}=C_{-}$. Но това *не е вярно*. Единственото заключение, което имаме право да направим, е, че при подобни въртения вероятностите за попадане в „горния“ сноп на приборите S и T са еднакви, т. е.

$$|C'_{+}|=|C_{+}| \text{ и } |C'_{-}|=|C_{-}|.$$

Но нямаме право да твърдим, че *фазите* на амплитудите, отнасящи се за прибора T, не могат да се различават при двете ориентации на приборите (*а* и *б* на фиг. 4.4).

В действителност двата прибора на фиг. 4.4 се различават помежду си, в което можем да се убедим по следния начин. Да предположим, че пред прибора S сме поставили друг прибор, който създава чисто $(+x)$ състояние. (На фигурата оста x е насочена надолу.) Тези частици биха се разделили в S на два снопа $(+z)$ и $(-z)$, но на изхода (в точката P_1) те пак биха се слели, възстановявайки състоянието $(+x)$. След това същото би станало и в прибора T. Ако след T поставим трети прибор U, чиято ос е насочена по посока на $+x$, както това е показано на фиг. 4.5,*а*, всички частици биха попадали в снопа $(+)$ на прибора U. Сега нека си представим какво ще стане, ако завъртим *едновременно* T и U на 90° (фиг. 4.5, *б*). Приборът T отново ще пропуска всички частици, достигащи до него, така че частиците, които попадат в U, ще бъдат в $(+x)$-състояние спрямо S. Но сега U анализира състоянието $(+y)$ (спрямо S), а това е вече съвсем друго. (Поради симетрията трябва да се очаква, че през него ще преминават само половината от частиците.)



Фиг. 4.5. Частица в състояние $(+x)$ има различно поведение в опитите *а* и *б*

Какво се е променило? Приборите T и U са разположени еднакво един спрямо друг. Възможно ли е да се измени *физиката* на процеса само защото T и U са ориентирани по друг начин? Нашето първо предположение е — не. Следователно разликата между двата случая, показани на фиг. 4.5, трябва да е свързано с *амплитудите* относно T. Тогава същото трябва да бъде и за случая, показан на фиг. 4.4. По някакъв начин частицата трябва да „узнае“, че в точката P_1 тя се е отклонила на някакъв ъгъл: Как може да стане това? Остава само едно предположение *стойностите* на C'_{+} и C_{+} и в двата случая да са равни, но могат — а в действителност те са *дължни* — да притежават различни *фази*. Достигаме до заключението, че C'_{+} и C_{+} трябва да бъдат свързани с формулата:

$$C'_{+}=e^{i\lambda}C_{+},$$

а C'_{-} и C_{-} — с формулата

$$C'_{-}=e^{i\mu}C_{-},$$

където λ и μ са реални числа, които трябва по някакъв начин да са свързани с ъгъла между S и T.

Единственото, което можем да кажем за сега за λ и μ е, че те не могат да бъдат равни помежду си (освен в специалния случай, показан на фиг. 4.5, *а*, когато T и S са ориентирани еднакво). Видяхме, че изменението на всички амплитуди с една и съща фаза не води до никакви физични следствия. Поради това можем към λ и μ да добавим което и да е постоянно число — това няма да измени нищо. Следователно имаме възможност *да изберем* λ и μ, равни на плюс и минус едно и също число. Винаги можем да вземем

$$\lambda'=\lambda-\frac{1}{2}(\lambda+\mu), \qquad \mu'=\mu-\frac{1}{2}(\lambda+\mu).$$

Тогава

$$\lambda'=\frac{\lambda}{2}-\frac{\mu}{2}=-\mu'.$$

И така договаряме се[1] да считаме $\mu = -\lambda$ и достигаме до общото правило, че въртенето на прибора, спрямо който се води отчета, на даден ъгъл около оста z води към трансформация, от вида

$$C'_+ = e^{i\lambda} C_+, \qquad C'_- = e^{-i\lambda} C_-. \tag{4.16}$$

Абсолютните стойности са еднакви, а фазите — различни. На тези фазови множители се дължат различните резултати в двата опита, показани на фиг. 4.5.

Сега трябва да установим закона, който свързва λ с ъгъла между приборите S и T. За един случай той е известен: когато ъгълът е нула, то и λ е нула. Нека предположим, че фазовото отместване λ е непрекъсната функция на ъгъла φ между S и T (вж. фиг. 4.4) при φ, клонящо към нула. Изглежда, че това е единственото разумно допускане. С други думи, ако завъртим T на малък ъгъл ε спрямо свързващата двата прибора права, λ ще бъде малко число, например $m\varepsilon$, където m е някакъв коефициент. Пишем $m\varepsilon$, защото може да докажем, че λ трябва да е пропорционално на ε. Ако поставим след T нов прибор T', образуващ с T също ъгъл ε, а с S — ъгъл 2ε, спрямо T ще имаме:

$$C'_+ = e^{i\lambda} C_+,$$

а спрямо T' —

$$C''_+ = e^{i\lambda} C'_+ = e^{i2\lambda} C_+.$$

Но знаем, че ако веднага след S поставим направо T', ще получим същия резултат! Значи, когато ъгълът се удвоява, то и фазата се удвоява. Тези аргументи можем естествено да обобщим и да построим произволно крайно въртене от последователни безкрайно малки въртения. Така достигаме до извода, че λ е пропорционално на φ за всеки ъгъл φ. Ето защо винаги можем да пишем $\lambda = m\varphi$.

Следователно общият резултат, до който достигаме, за въртене на прибора T около оста z спрямо S под ъгъл φ е:

$$C'_+ = e^{im\varphi} C_+, \qquad C'_- = e^{-im\varphi} C_-. \tag{4.17}$$

За ъгъла φ и за всички въртения, които ще срещнем по-нататък, ще считаме, че са *положителни*, ако съвпадат с посоката на въртене на десния винт, който се завинтва по положителната ос z.

Остава да определим какво трябва да бъде m. Да опитаме следното разсъждение: нека T да е завъртян на 360°; ясно е, че тогава отново ще се намираме под ъгъл нула градуса и затова трябва да имаме $C'_+ = C_+$ и $C'_- = C_-$, т. е. $e^{im2\pi} = 1$. Получаваме $m = 1$. Само че *това разсъждение не ни върши никаква работа.*

За да се убедим в това, нека допуснем, че приборът T е завъртян на 180°. Ако m беше равно на единица, бихме получили $C'_+ = e^{i\pi} C_+ = -C_+$ и $C'_- = e^{-i\pi} C_- = -C_-$. Но това е пак *първоначалното* състояние. *Двете* амплитуди са просто умножени с -1 и това ни връща към първоначалната физична система. (Още един случай на всеобща смяна на фазите.) Следователно ако ъгълът между T и S (фиг. 4.5, *б*) се увеличи на 180°, системата (спрямо T) ще се окаже неотличима от случая при 0° и частиците ще могат да преминават през канала (+) на прибора U. Но при 180° състоянието (+) на U представлява състоянието $(-x)$ на S. Така че състоянието $(+x)$ става състояние $(-x)$. Но ние не сме направили нищо за изменяне на началното състояние и затова отговорът е грешен. Следователно m не може да бъде равно на единица.

Ясно е, че всичко трябва да бъде иначе: само въртения на 360° (и някакви други по-малки ъгли) трябва да възпроизвеждат първоначалното физическо състояние. Това може да стане при

[1] На това може да се погледне и иначе: Ние просто извършваме трансформация към „стандартна форма", описано в § 2, използувайки формулата (4.15).

$m=\frac{1}{2}$. Тогава и само тогава първият ъгъл, възпроизвеждащ същото физично състояние, ще бъде ъгълът $\varphi=360°$[1]. При това ще имаме

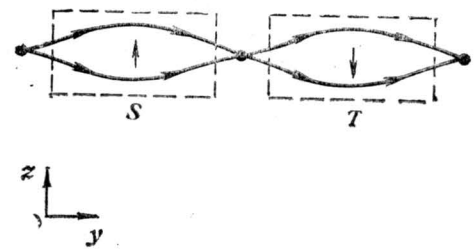
$$\left.\begin{aligned} C'_+ &= -C_+ \\ C'_- &= -C_- \end{aligned}\right\} \text{ при } 360° \text{ около оста } z. \tag{4.18}$$

Много куриозно е изведнъж да се забележи, че въртенето на прибора на 360° води до нови амплитуди за процесите. В действителност обаче тези амплитуди не са нови, понеже едновременната промяна на знака не води до никаква нова физика. Ако някой намисли да промени знаците на всички амплитуди, смятайки, че е извършено въртене на 360°, това си е негова работа — физиката ще си остане същата[2]. И така окончателният отговор е: ако знаем амплитудите C_+ и C_- за частици със спин $^1/_2$ спрямо дадена система S и след това трябва да използуваме базисната система T (T се получава от S чрез въртене на ъгъл φ спрямо оста z), то новите амплитуди ще се изразяват чрез старите по следния начин:

$$\left.\begin{aligned} C'_+ &= e^{i\varphi/2}C_+ \\ C'_- &= e^{-i\varphi/2}C_- \end{aligned}\right\} \text{ на ъгъл } \varphi \text{ около оста } z. \tag{4.19}$$

4-4. Въртения на 180° и 90° около оста y

Сега да разгледаме трансформацията за въртене на прибора T на ъгъл 180° (спрямо прибора S) около ос, *перпендикулярна* на оста z, например около оста y. (Координатните оси са показани на фиг. 4.1.) С други думи използуват се два еднакви прибора на Щерн — Герлах, като втория от тях, T, завъртаме спрямо първия, S, с „краката нагоре“ (фиг. 4.6). Ако разглеждаме частиците като малки магнитни диполи, частицата, която се намира в състояние $(+S)$ (в първия прибор тя избира „горния“ път) и във втория прибор също ще избира „горния“ път, т. е. ще се окаже в *минус*-състояние спрямо T. (В преобърнатия прибор T се обръщат едновременно и полето, *и* посоката на неговия градиент; за частици с дадена посока на магнитния момент силата не се променя.) Това, което за S е било „нагоре“, за T ще бъде „надолу“. За такова относително разположение на S и T трансформациите трябва да дадат



Фиг. 4.6. Въртене на 180° около оста y

$$|C'_+| = |C_-|, \quad |C'_-| = |C_+|.$$

Както и по-рано не можем да изключим добавъчните фазови множители; в действителност може да се окаже, че

$$C'_+ = e^{i\beta}C_-, \quad C'_- = e^{i\gamma}C_+ \tag{4.20}$$

където β и γ подлежат на определяне.

А какво можем да кажем за въртене около оста y на ъгъл 360°? Вече знаем отговора за въртене на 360° около z: амплитудата за пребиваване във всяко състояние променя знака си. Въртения на 360° около която и да било ос винаги довежда прибора в първоначалното му положение. Затова резултатът от *всяко* въртене на 360° трябва да е такъв, какъвто и от въртене на 360° около оста z — всички амплитуди трябва да променят знака си. Сега си представете две последователни въртения на 180° около оста y по формула (4.20); трябва да получим резултата (4.18). С други думи,

[1] Разбира се би могло и $m=-\frac{1}{2}$. Но тогава от (4.17) става ясно, че изменението на знака ще преопредели понятието „спин нагоре“.

[2] Нека отбележим, че ако последователност от малки въртения довежда към първоначалната ориентация, винаги съществува възможност да се проследи цялата история на процеса, така че въртене на 360° да се различи от въртене на 0° (интересно е обаче, че за въртене на 720° това *не е вярно*).

$$C''_+ = e^{i\beta} C'_- = e^{i\beta} e^{i\gamma} C_+ = -C_+,$$
$$C''_- = e^{i\gamma} C'_+ = e^{i\gamma} e^{i\beta} C_- = -C_-. \qquad (4.21)$$

Това означава, че

$$e^{i\beta} e^{i\gamma} = -1 \text{ или } e^{i\gamma} = -e^{-i\beta}.$$

Следователно $\gamma = -\beta + \pi$ и трансформацията за въртене на 180° около оста y може да бъде записана така:

$$C'_+ = e^{i\beta} C_-; \qquad C'_- = -e^{-i\beta} C_+. \qquad (4.22)$$

Разсъжденията, чрез които достигнахме до тези изводи, се отнасят със същата сила и за въртения на 180° около която и да е ос в равнината xy, макар че въртенията около различните оси ще дават различни стойности за β. Но това е единственото, по което могат да се различават. В стойността на β има известен произвол, но след като веднаж е определена за някоя ос в равнината xy, тя е определена и за всички останали оси. *Прието* е да се избира $\beta = 0$ за въртене на 180° около оста y.

За да покажем, че имаме право на такъв избор, нека предположим, че сме решили β да не е нула за такова въртене около оста y; тогава може да се покаже, че в равнината xy съществува *някаква друга* ос, за която съответната фаза *ще бъде* нула. Да определим фазовия множител β_A за оста A, образуваща ъгъл α с y, както това е показано на фиг. 4.7, *а*. (За удобство на фигурата ъгълът α е отрицателен, но това не е съществено). Ако сега вземем прибора T, първоначално насочен като прибора S, а след това го завъртим около оста A на 180°, неговите оси — да ги означим с x'', y'' и z'' — ще се разположат, както е показано на фиг. 4.7, *а*. Амплитудите спрямо T ще станат

$$C''_+ = e^{i\beta_A} C_-,$$
$$C''_- = -e^{-i\beta_A} C_+. \qquad (4.23)$$

Но същата ориентация може да се достигне и чрез двете последователни въртения, показани на фиг. 4.7, *б* и *в*. Да вземем отначало прибора U, завъртян спрямо S на 180° около оста y. Осите x', y' и z' на прибора U ще бъдат като показаните на фиг. 4.7, *б*, а амплитудите *спрямо* U ще се дават от формулите (4.22).

Забележете сега, че от U към T може да се премине със завъртане на прибора U около „оста z“, т. е. около z', както това е показано на фиг. 4.7, *в*. От фигурата се вижда, че търсеният ъгъл е два пъти по-голям от α, но е насочен в обратна посока (спрямо z''). Използувайки трансформацията (4.19) с $\varphi = -2\alpha$, получаваме

$$C''_+ = e^{-i\alpha} C'_+, \qquad C''_- = e^{+i\alpha} C'_-. \qquad (4.24)$$

Като поставим (4.22) в (4.24), получаваме

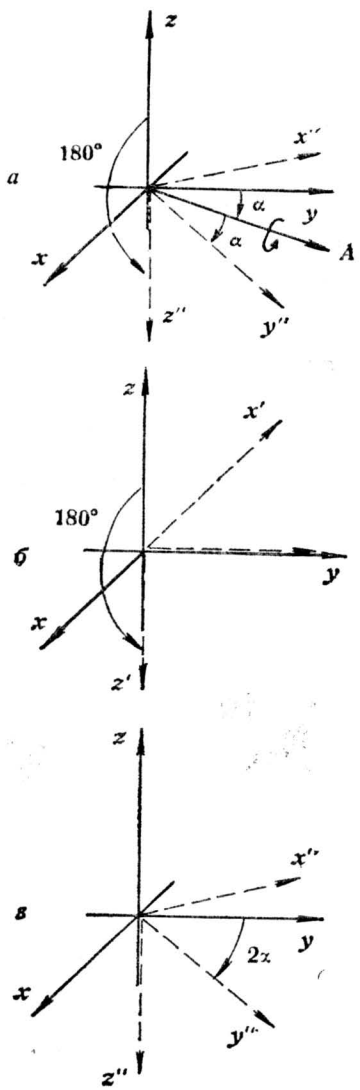
$$C''_+ = e^{i(\beta-\alpha)} C_-, \quad C''_- = -e^{-i(\beta-\alpha)} C_+. \qquad (4.25)$$

Разбира се тези амплитуди трябва да съвпадат с получените по (4.23). Следователно β_A трябва да бъде свързано с α и β по формулата

$$\beta_A = \beta - \alpha. \qquad (4.26)$$

Това означава, че ако ъгъл α между оста A и оста y (на прибора S) е равен на β, в трансформацията за въртене на 180° около оста A трябва да имаме $\beta_A = 0$.

Щом обаче за *някоя* от осите, перпендикулярни на z, е възможно $\beta = 0$, нищо не ни пречи да приемем тази ос за ос y. Това е въпрос само на *споразумение*. *Извод*: за въртения на 180° около оста y имаме



Фиг. 4.7. Въртене на 180° около оста A (*а*) е еквивалентно на въртене на 180° около оста y (*б*), последвано от въртене около оста z' (*в*)

$$\left.\begin{aligned} C'_+ &= C_- \\ C'_- &= -C_+ \end{aligned}\right\} \text{ на } 180° \text{ около оста } y. \tag{4.27}$$

Продължавайки обсъждането на въртенията около оста y, да разгледаме трансформационната матрица за въртене на 90°. Можем да установим нейния вид като вземем пред вид, че две последователни въртения на 90° около една и съща ос са равносилни на едно въртене на 180°. Да напишем трансформациите за 90° в най-общ вид:

$$C'_+ = aC_+ + bC_-, \quad C'_- = cC_+ + dC_-. \tag{4.28}$$

Второто въртене на 90° около същата ос ще има същите коефициенти

$$C''_+ = aC'_+ + bC'_-, \qquad C''_- = cC'_+ + dC'_-. \tag{4.29}$$

Като поставим (4.28) в (4.29) получаваме

$$\begin{aligned} C''_+ &= a(aC_+ + bC_-) + b(cC_+ + dC_-), \\ C''_- &= c(aC_+ + bC_-) + d(cC_+ + dC_-). \end{aligned} \tag{4.30}$$

Но от (4.27) знаем, че

$$C''_+ = C_- \quad \text{и} \quad C''_- = -C_+,$$

така че трябва да имаме

$$\begin{aligned} ab + bd &= 1 \\ a^2 + bc &= 0 \\ ac + cd &= -1 \\ bc + d^2 &= 0. \end{aligned} \tag{4.31}$$

Тези четири уравнения са напълно достатъчни, за да определим неизвестните a, b, c и d. Това не е трудно да се направи. Погледнете второто и четвъртото уравнение. Вижда се, че $a^2 = d^2$, откъдето $a = d$ или $a = -d$. Но последното отпада, защото в такъв случай не би се изпълнило първото от уравненията. Следователно $a = d$. Тогава веднага определяме $b = \frac{1}{2a}$ и $c = -\frac{1}{2a}$. Сега всички неизвестни са изразени чрез a. Заместваики, например във второто уравнение изразите за b и c, получаваме

$$a^2 - \frac{1}{4a^2} = 0 \qquad \text{или} \qquad a^4 = \frac{1}{4}.$$

От четирите решения на това уравнение само две водят до детерминанта в стандартна форма. Можем да приемем $a = \frac{1}{\sqrt{2}}$ и тогава [1]

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}, & b &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ c &= -\frac{1}{\sqrt{2}}, & d &= \frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned}$$

С други думи за двата прибора S и T, при условие, че T е завъртян спрямо S на 90° около оста y, трансформацията ще има вида

$$\left.\begin{aligned} C'_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(C_+ + C_-) \\ C'_- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(-C_+ + C_-) \end{aligned}\right\} \text{ на } 90° \text{ около оста } y. \tag{4.32}$$

[1] Второто решение изменя всички знаци на a, b, c и d и съответствува на въртене на —270°.

Разбира се тези уравнения могат да се решат относно C_+ и C_-; това ще ни даде трансформацията при въртене на 90° около оста y. Сменяйки примованите букви с непримовани и обратно, можем да напишем

$$\left.\begin{aligned} C'_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,(C_+ - C_-) \\ C'_- &= \frac{1}{\sqrt{2}}\,(C_+ + C_-) \end{aligned}\right\} \text{ на } -90° \text{ около оста } y.\bullet \qquad (4.33)$$

4-5. Въртения около оста x

Вие ще кажете: „Това вече става смешно! На какво ни учат: въртене на 47° около оста y, след това — на 33° около оста x! Дълго ли още ще продължава това?“ Не. Оказва се, че почти всичко съм разказал. Като знаем само две трансформации — на 90° около оста y и на произволен ъгъл около оста z (както помните, с това започнахме), ние вече сме готови да разглеждаме всякакви въртения.

За илюстрация нека предположим, че ни интересуват въртенията на ъгъл α около оста x. Знаем как става въртенето на ъгъл α около z, но сега е необходимо въртене около оста z. Как да го определим? Нека отначало да завъртим оста надолу до оста x, а това е въртене на $+90°$ около оста y (фиг. 4.8). След това въртим на ъгъл α около оста z'. И накрая — на $(-90°)$ около оста y''. Резултатът от тези три въртения е същият, както и от въртене на ъгъл α около оста x. Такива са свойствата на пространството.

Трудно е да си представим всички тези съчетания от въртения и техните резултати. Наистина странно е, че живеейки в тримерно пространство, трудно възприемаме какво ще стане, ако отначало се обърнем така, а след това — инак. Вероятно ако бяхме птици или риби и ако от собствен опит знаехме какво става, когато през цялото време правим разни салта, може би щеше да ни бъде по-лесно да си представяме подобни неща.

Нека все пак, позовавайки се на това, което вече ни е известно, да изведем трансформацията за въртене на ъгъл α около оста x. При първото въртене на $+90°$ около оста y амплитудите се преобразуват според (4.32). Ако завъртяните оси означим с x', y' и z', следващото въртене на ъгъл α около z' ще ни доведе до координатна система x'', y'' и z'', за която

$$C''_+ = e^{i\alpha/2}C'_+, \qquad C''_- = e^{-i\alpha/2}C'_-.$$

Последното въртене на $-90°$ около оста y'' ще доведе до системата x''', y''' и z'''; от (4.33) следва:

$$C'''_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(C''_+ - C''_-), \qquad C'''_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(C''_+ + C''_-).$$

От тези две трансформации можем да получим

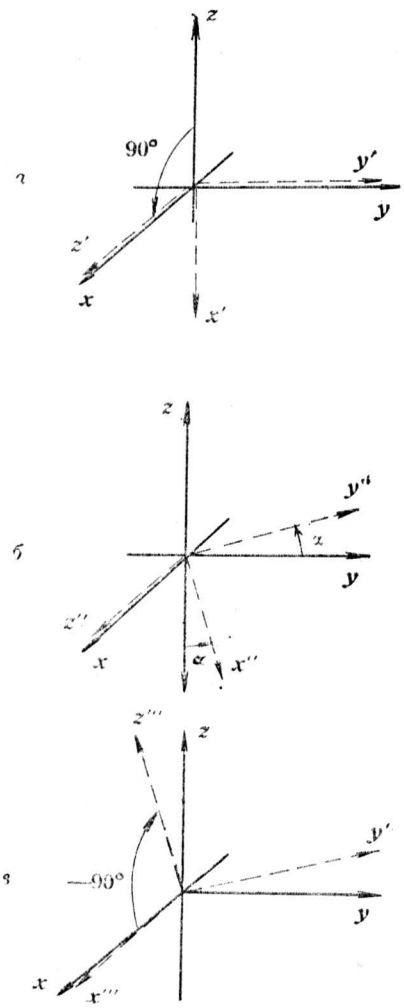
$$C'''_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(e^{+i\alpha/2}C'_+ - e^{-i\alpha/2}C'_-),$$

$$C'''_- = \frac{1}{\sqrt{2}}\,(e^{+i\alpha/2}C'_+ + e^{-i\alpha/2}C'_-)\,.$$

Като заместим тук C'_+ и C'_- от (4.32) достигаме до окончателния вид

$$C'''_+ = \frac{1}{2}\left\{e^{+i\alpha/2}\,(C_+ + C_-) - e^{-i\alpha/2}\,(-C_+ + C_-)\right\},$$

$$C'''_- = \frac{1}{2}\left\{e^{+i\alpha/2}\,(C_+ + C_-) + e^{-i\alpha/2}\,(-C_+ - C_-)\right\}.$$



Фиг. 4.8. Въртене на ъгъл α около оста x е равнозначно на въртене на $+90°$ около оста y (*а*), последвано от въртене на α около ос z' (*б*), след кое става въртене на $-90°$ около оста y'' (*в*)

А като вземем пред вид, че

$$e^{i\theta}+e^{-i\theta}=2\cos\theta,$$

$$e^{i\theta}-e^{i\theta}=2i\sin\theta,$$

тези формули ще се запишат по-просто:

$$\left.\begin{aligned} C'_{+}&=\left(\cos\frac{\alpha}{2}\right)C_{+}+i\left(\sin\frac{\alpha}{2}\right)C_{-}\\ C'_{-}&=i\left(\sin\frac{\alpha}{2}\right)C_{+}+\left(\cos\frac{\alpha}{2}\right)C_{-}\end{aligned}\right\}\ \text{на ъгъл } \alpha \text{ около оста } x. \qquad (4.34)$$

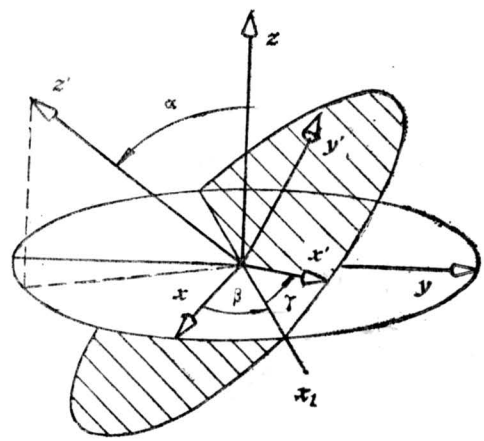
Това представляват и търсените трансформации за въртене около оста x на ъгъл α. Те имат само малко по-сложен вид от другите трансформации.

4-6. Произволни въртения

Сега вече е ясно какво ще бъде положението при *произволни* въртения. Най-напред забележете, че всякаква взаимна ориентация на две координатни системи може да се опише с помощта на три ъгъла (фиг. 4.9). Ако имате системата x', y', z', ориентирана спрямо x, y, z произволно, връзката между тях може да се определи с помощта на трите ъгли на Ойлер α, β и γ, определящи трите последователни въртения, които довеждат системата x, y, z в системата x', y', z'. Като тръгнем от x, y, z, завъртаме нашата система на ъгъл β около оста z и докарваме оста x да съвпадне с оста x_1. След това извършваме въртене на ъгъл α около тази временна ос x_1, за да доведем z до z'. И накрая, въртим около новата ос z (т. е. около z') на ъгъл γ довеждаме x_1 в x', а оста y в y'[1]. Ние знаем трансформациите за всяко от тези въртения — те се дават с формулите (4.19) и (4.34). Комбинирайки ги в необходимия ред, получаваме:

$$C'_{+}=\cos\frac{\alpha}{2}\,e^{\frac{i}{2}(\beta+\gamma)}C_{+}+i\sin\frac{\alpha}{2}\,e^{-\frac{i}{2}(\beta-\gamma)}C_{-},$$

$$C'_{-}=i\sin\frac{\alpha}{2}\,e^{\frac{i}{2}(\beta-\gamma)}C_{+}+\cos\frac{\alpha}{2}\,e^{-\frac{i}{2}(\beta+\gamma)}C_{-}. \qquad (4.35)$$



Фиг. 4.9. Ориентацията на която и да е координатна система x', y', z', спрямо друга система x, y, z може да бъде определена с помощта на Ойлеровите ъгли α, β и γ

И така започвайки с някои предположения за свойствата на пространството, изведохме трансформациите за амплитудите при произволни въртения. Това означава, че ако са ни известни амплитудите за частици със спин $^1/_2$ да преминат от кое да е състояние в един от двата снопа на прибора S с оси x, y и z, можем да пресметнем каква част от частиците ще преминат във всеки от сноповете на прибора T с оси x', y' и z'. С други думи, ако имаме частици със спин $^1/_2$ в състояние ψ, за които амплитудите за пребиваване „нагоре“ и „надолу“ спрямо оста z в координатната система x, y, z са равни на $C_{+}=\langle+|\psi\rangle$ и $C_{-}=\langle-|\psi\rangle$, ще знаем и амплитудите C'_{+} и C'_{-} за пребиваване в състояния „нагоре“ и „надолу“ спрямо оста z' на произволна друга координатна система x', y' z'. Четирите коефициента в (4.35) образуват „трансформационната матрица“, с помощта на която може да се проектират амплитудите на частица със спин $^1/_2$ в други координатни системи.

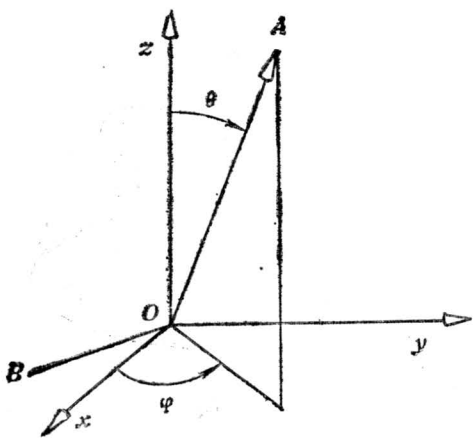
Сега да решим няколко примера, за да разберем как работи всичко това. Да вземем следния прост пример. Пускаме атоми със спин $^1/_2$ през прибор на Щерн—Герлах, пропускащ само съ-

[1] Не е трудно да се покаже, че системата x, y, z може да се доведе до системата x', y', z' чрез следните три въртения около *първоначалните* оси: 1) въртене на ъгъл γ около оста z; 2) въртене на ъгъл α около оста x; 3) въртене на ъгъл β около оста z.

стояния $(+z)$. Каква е амплитудата атомът да се окаже в състояние $(+x)$? Оста $+x$ съвпада с оста $+z'$ на системата, завъртяна на 90° около оста y. Затова в такава задача най-добре ще бъде да използуваме изразите (4.32), макар че може да се приложат и пълните уравнения (4.35). Понеже $C_+=1$ и $C_-=0$, получаваме $C'_+=\frac{1}{\sqrt{2}}$. Вероятността за събитието е квадратът на модула от тази амплитуда; по такъв начин съществува 50% вероятност частицата да премине през прибор, отбиращ състояния $(+x)$. Ако ни интересува състоянието $(-x)$, амплитудата ще бъде $-\frac{1}{\sqrt{2}}$, т. е. пак дава вероятност $^1/_2$, което впрочем трябва и да се очаква, поради симетрията на пространството. Така че, ако частицата се намира в състояние $(+z)$, за нея е еднакво вероятно да попадне в състояние $(+x)$ или $(-x)$, но фазите са противоположни.

Оста y е също без претенции. За частица в състояние $(+z)$ има еднаква вероятност да попадне в състояние $(+y)$ или $(-y)$. Но сега (според формулата за въртене на $-90°$ около оста x) амплитудите са $\frac{1}{\sqrt{2}}$ и $-\frac{i}{\sqrt{2}}$. В този случай разликите във фазите между двете амплитуди вече не е 180°, както това беше за $(+x)$ и $(-x)$-състояния, а 90°. В това се проявява различието между осите x и y.

Ето още един пример. Нека да е известно, че частица със спин $^1/_2$ се намира в състояние ψ и е поляризирана „нагоре“ спрямо оста A, определена чрез ъглите θ и φ (фиг. 4.10). Искаме да знаем амплитудата $<C_+|\psi>$ частицата да се окаже в състояние „нагоре“ спрямо z и амплитудата $<C_-|\psi>$ тя да се окаже в състояние „надолу“ спрямо същата ос z. Тези амплитуди можем да намерим, ако предположим, че оста A съвпада с оста z' на системата, за която оста x' е насочена произволно, да кажем, лежи в равнината, образувана от A и z. Тогава можем да приведем системата A в системата x, y, z с три въртения. Най-напред трябва да завъртим на $-\frac{\pi}{2}$ около оста A, което ще доведе оста x в линията B на фигурата. След това завъртаме на $-\theta$ около B (около новата ос x' на системата A), така че оста A да съвпадне с оста z. И накрая завъртаме около оста z на ъгъл $\left(\frac{\pi}{2}-\varphi\right)$. Като си спомним, че отначало сме имали само състоянието $(+)$ спрямо A, получаваме



Фиг. 4.10. Оста A, определена чрез полярните ъгли θ и φ

$$C_+=\cos\frac{\theta}{2}\,e^{-i\varphi/2}, \qquad C_-=\sin\frac{\theta}{2}\,e^{+i\varphi/2}. \tag{4.36}$$

Накрая бихме искали да представим резултатите от тази глава във форма, която ще се окаже полезна за нашата по-нататъшна работа. Първо, нека напомним, че основният ни резултат (4.35) може да бъде записан в други означения. Забележете, че (4.35) е еквивалентно на (4.4). С други думи в (4.35) коефициентите пред $C_+=<+S|\psi>$ и $C_-=<-S|\psi>$ са всъщност амплитудите $<jT|iS>$ в (4.4), т. е. амплитудите частица в състояние i спрямо S да се окаже в състояние j спрямо T (когато ориентацията на T спрямо S се дава чрез ъглите α, β и γ). В израза (4.6) ги означихме с R^{TS}_{ji}. (Както виждате, имаме предостатъчно означения!) Например $R^{TS}_{-+}=<-T|+S>$ — това е коефициентът пред C_+ във формулата за C'_-, а именно: $i\sin\frac{\alpha}{2}\exp[i(\beta-\gamma)/2]$. Поради това крайните резултати са представени в таблица 4.1.

Би било удобно да имаме тези амплитуди, написани за някой особен избран случай. Нека $R_z(\varphi)$ да бъде въртенето на ъгъл φ около оста z. Така може да се означат и съответните матрици на завъртене (мълчаливо изпускайки индексите i и j). В този смисъл $R_z(\varphi)$ и $R_y(\varphi)$ ще означават завъртания на ъгъл φ около ос x или R_x около ос y.

В табл. 4.2 са дадени матриците — таблици на амплитудите $<jT|iS>$, които проектират амплитудите от системата S в системата T, където T се получава от S чрез указаното въртене.

Таблица 4.1

Амплитудите $<jT|iS>$ за въртене, определено от ъглите на Ойлер α, β и γ (фиг. 4.9)

$<jT\|iS>$	$+S$	$-S$
$+T$	$\cos\frac{\alpha}{2}\, e^{i(\beta+\gamma)/2}$	$i\sin\frac{\alpha}{2}\, e^{-i(\beta-\gamma)/2}$
$-T$	$i\sin\frac{\alpha}{2}\, e^{i(\beta-\gamma)/2}$	$\cos\frac{\alpha}{2}\, e^{-i(\beta+\gamma)/2}$

Таблица 4.2

Амплитудите $<jT|iS>$ за въртене $R(\varphi)$ на ъгъл φ около една от осите

$R_z(\varphi)$

$<jT\|iS>$	$+S$	$-S$
$+T$	$e^{i\varphi/2}$	0
$-T$	0	$e^{-i\varphi/2}$

$R_x(\varphi)$

$<jT\|iS>$	$+S$	$-S$
$+T$	$\cos\frac{\varphi}{2}$	$i\sin\frac{\varphi}{2}$
$-T$	$i\sin\frac{\varphi}{2}$	$\cos\frac{\varphi}{2}$

$R_y(\varphi)$

$<jT\|iS>$	$+S$	$-S$
$+T$	$\cos\frac{\varphi}{2}$	$\sin\frac{\varphi}{2}$
$-T$	$-\sin\frac{\varphi}{2}$	$\cos\frac{\varphi}{2}$

5

Зависимост на амплитудите от времето

5-1. Атоми в покой; стационарни състояния

5-2. Равномерно движение

5-3. Потенциална енергия; запазване на енергията

5-4. Сили; класическо приближение

5-5. „Прецесия“ на частици със спин $^1/_2$

5-1. Атоми в покой; стационарни състояния

Сега искаме да разкажем малко и за поведението на амплитудите на вероятностите с времето. Казваме „малко“, защото всъщност поведението във времето по необходимост включва и поведението в пространството. Така че ако желаем да опишем поведението на частиците с цялата коректност и пълнота, ще се окажем в много сложно положение. Пред нас ще възниква постоянна трудност — или да изучаваме нещата строго логически, но абсолютно абстрактно, или без да се грижим за строгостта, да даваме някаква представа за истинското положение на нещата, отлагайки подробното изследване за по-късно. Сега, когато говорим за зависимостта на амплитудата от енергията, имаме намерение да изберем втория път. Ще изкажем редица твърдения. При това няма да се стремим към строгост, а просто ще разкажем какво е положението, така че да почувствувате поведението на амплитудите на вероятностите във времето. В хода на изложението ще нараства точността на описанието, така че, моля ви, недейте да нервничите, гледайки как фокусникът извлича разни неща от въздуха. И наистина те се вземат от нещо неосезаемо — от духа на експеримента и от въображението на много хора. Но да преминем целия стадий на историческото развитие на разглеждания проблем е доста дълга работа, затова и ще го пропуснем. Бихме могли да се гмурнем в абстракции и да изведем всичко много строго (но вие едва ли ще го разберете) или да преминем през множество експерименти, които да потвърдят нашите разсъждения. Сега избираме средния път.

При известни условия единичен електрон в празното пространство може да притежава при някои условия определена енергия. Например, ако той е в покой (т. е. не се намира в движение — не притежава нито импулс, нито кинетична енергия), притежава енергия на покой. По-сложен обект, да кажем атом, също може да се намира в покой и да притежава определена енергия, но той може да се окаже и вътрешно възбуден — възбуден до друго енергетично ниво. (Ще опишем по-късно механизма на този процес.) Често имаме право да считаме, че атомът във възбудено състояние притежава определена енергия; впрочем това е вярно само приблизително. Атомът не остава възбуден вечно, защото той се стреми да се върне в основното си състояние. Така че винаги съществува някаква амплитуда за възникване на ново състояние — с атом в основното състояние и излъчен квант на електромагнитното поле. Пълната енергия на системата — до и след процеса на излъчване, е една и съща, но енергията *на атома* е по-малка. Затова не е много точно да се говори, че възбуденият атом притежава *определена* енергия; но често това е удобно, пък и не е много неправилно.

Впрочем защо всичко тече в една посока и не тече в обратната? Защо атомът излъчва светлина? Отговорът е свързан с ентропията. Когато енергията е във вид на електромагнитно поле, пред нея се откриват толкова различни пътища, толкова различни места за попадане, че ако потърсим условието за равновесие, ще се убедим, че най-вероятното положение ще бъде полето да се окаже възбудено с един фотон, а атомът — невъзбуден. И на фотонът му е необходимо немалко време, за да се върне и открие, че може отново да възбуди атома. Това е напълно аналогично на класическата задача: защо ускореният заряд излъчва?

Не защото той „иска“ да загуби енергия, не, та нали, когато той излъчва, енергията на Вселената всъщност остава същата. Просто излъчването и поглъщането винаги става в посока на увеличаване на *ентропията*.)

Ядрата също могат да съществуват в различни енергетични нива и в приближението, когато се пренебрегват електромагнитните ефекти, имаме право да казваме, че ядрото във възбудено състояние си остава същото. Макар и да знаем, че ядрото не остава завинаги във възбудено състояние, често е по-полезно да разглеждаме някакво идеализирано приближение, което е попросто за анализиране. При това в някои случаи това приближение е узаконено. (Когато извеждахме класическите закони за падане на телата, пренебрегнахме триенето, а в действителност почти никога не се случва *съвсем* да липсва триене.)

Освен това съществуват и т. нар. „странни частици“ с различни маси. Но по-тежките от тях се разпадат на по-леки и пак би могло неправилно да казваме, че тяхната енергия е точно определена. Това би било вярно, ако те се запазваха вечно. Така че, когато приблизително считаме, че такива частици притежават определена енергия, то тогава забравяме, че те трябва да се разпаднат. Сега няма да разглеждаме такива процеси, а след време ще се научим как да се справяме и с тях.

Нека имаме атом (или електрон, или каква да е частица) в състояние на покой с определена енергия E_0. Под E_0 разбираме масата на частицата m_0, умножена с c^2. Масата включва всякакви вътрешни енергии; така че масата на възбудения атом се различава от масата на същия атом в основно състояние. (*Основно* състояние означава състоянието с най-ниска енергия.) Да наречем E_0 „енергия на покой“.

За атом, намиращ се в състояние на *покой*, квантовомеханичната *амплитуда* за намирането му в някое място е *навсякъде една и съща — тя не зависи* от положението. Това означава, че *вероятността да се намери* атом на което и да е място е една и съща. Но това означава и нещо повече. *Вероятността* би могла да не зависи от положението, но *фазата на амплитудата* би могла да се мени от точка в точка. Обаче за частици в покой пълната амплитуда навсякъде е еднаква. Обаче тя зависи от *времето*. Амплитудата за това частица в състояние с определена енергия E_0 да се намира в точката (x, y, z) в момент t, е

$$ae^{-i(E_0/\hbar)t}, \tag{5.1}$$

където a е някаква константа. Амплитудата за пребиваване на дадено място в пространството е еднаква за всички точки, но затова зависи от времето, съгласно (5.1). Ще приемем, че това правило винаги е вярно.

Разбира се, (5.1) може да се запише така:

$$ae^{-i\omega t}, \tag{5.2}$$

където

$$\hbar\omega = E_0 = Mc^2.$$

Тук M е масата на покой на атома или частицата. Съществуват три различни начина за определяне на енергията: по честотата на амплитудата, по енергията в класическия смисъл или по инертната маса. Всички те са равностойни; това са просто три различни начина да изразяваме едно и също нещо.

Може да ви се стори странно, че „частица“ може да притежава еднаква амплитуда да се окаже където и да е в пространството. Защото между другото винаги си представяме „частица“ като неголям предмет, разположен „някъде“. Но не забравяйте принципа на неопределеността. Само частица, с определена енергия, притежава и определен импулс. Ако неопределеността на импулса е нула, от съотношението за неопределеност $\Delta p \cdot \Delta x \approx \hbar$ следва, че неопределеността в положението трябва да бъде

безкрайно голяма. Именно това имаме пред вид, когато казваме, че съществува еднаква амплитуда частицата да се намира във всички точки на пространството.

Ако вътрешните части на атома се намират в някакво друго състояние с друга пълна енергия, амплитудата се изменя с времето по друг начин. А ако не знаете в какво състояние се намира атомът, то се появява известна амплитуда за пребиваване в едно състояние и някаква друга амплитуда за пребиваване в друго състояние и всяка от тях със своя честота. Между тези две компоненти се получава интерференция, подобна на явлението биене, което в случая се проявява като променлива вероятност. В атома нещо ще „назрява", макар той да е в покой, в смисъл, че центърът на масите му няма да се движи. Ако пък атомът има само една определена енергия, амплитудата се дава с формула (5.1) и квадратът на модула на тази амплитуда не зависи от времето. Следователно, ако енергията е определена и вас ви интересува *вероятността* за събитието, тя не зависи от времето. Макар самите *амплитуди* да зависят от времето, но ако енергията е *определена*, те се изменят като имагинерна експонента и абсолютната им стойност (модулът) не се изменя.

Ето защо често казваме, че атом в определено енергетично ниво се намира в *стационарно състояние*. Ако вие извършите някакви измервания, ще установите, че нищо (вероятностно) не се изменя с времето. За да се мени вероятността с времето, трябва да имаме интерференция на две амплитуди с различни честоти, а това би означавало, че енергията е неопределена. Системата би имала една амплитуда за пребиваване в състояние с една енергия и друга амплитуда — за пребиваване в състояние с друга енергия. Така в квантовата механика се описва система, *поведението* на която зависи от времето.

Ако имаме случай на смесване на две различни състояния с различни енергии, амплитудата на всяко от тях ще се мени с времето според (5.2), да кажем като

$$e^{-i(E_1/\hbar)\,t} \quad \text{и} \quad e^{-i\,(E^2/\hbar)\,t}. \tag{5.3}$$

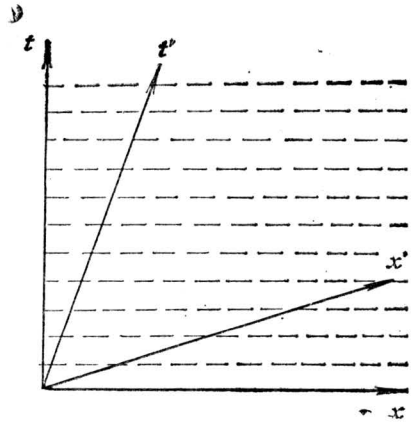
И ако имаме комбинация от тези две състояния, между тях се появява интерференция. Но забележете, че добавянето на една и съща константа към енергията не изменя нищо. Ако някой друг използува друга енергетична скала, на която всички енергии са преместени с дадена постоянна величина (например A), амплитудите на същите две състояния ще се окажат

$$e^{-i\,(E_1+A)\,t/\hbar} \quad \text{и} \quad e^{-i\,(E_{21}+A)\,t/\hbar}. \tag{5.4}$$

Всички амплитуди биха се оказали умножени с един и същ множител $\exp[-i(A/\hbar)t]$ и във всички линейни комбинации, във всички интерференции би участвувал същият множител. Ако той изчислява вероятностите, като взема квадратите на тези амплитуди, ще достигне до същите резултати, до които достигаме и ние. Изборът на началото на енергетичната скала не изменя с нищо нещата; енергията може да се отчита от която и да е нула. В релативистичните задачи е по-удобно да се измерва енергията така, че в нея да влиза масата на покой, но за много нерелативистични цели често по-добре би било тя да се извади от всички появяващи се енергии. Например в случая на атом е удобно да се извади енергията $M_s c^2$, където M_s е масата на *отделните* негови части, ядро и електрони, които разбира се, се отличават от масата на самия атом. В други задачи е полезно да извадим енергията $M_g c^2$, където M_g е масата на целия атом в *основно* състояние; тогава остатъчната енергия представлява енергията на възбуждане на атома. Следователно когато пожелаем, можем да изместваме нулата на енергията както си искаме и това не изменя нищо (при условие че всички енергии в даденото конкретно пресмятане са изместени с едно и също число). С това завършваме разглеждането на частици в покой.

5-2. Равномерно движение

Ако приемем, че теорията на относителността е вярна, частицата в състояние на покой спрямо една инерциална система може да се окаже в състояние на равномерно движение спрямо друга инерциална система. За частица в система на покой амплитудата на вероятността е еднаква за всички x, y и z, но зависи от t. *Модулът* на амплитудата за всички t е еднаква, но *фазата* зависи от t. Можем да получим картината на поведението на амплитудите, ако прекараме линиите на еднакви фази (например нулевите) като функция на x и t. За частици в покой тези линии на равни фази са успоредни на оста x и разположени по оста t на равни разстояния (пунктираните линии на фиг. 5.1).



Фиг. 5.1. Релативистична трансформация на амплитудата на частица в система $x-t$

В друга координатна система (x', y', z', t'), движеща се спрямо частицата, да кажем в посока x, координатите x' и t' на някаква точка в пространството са свързани с x и t чрез трансформациите на Лоренц. Тези трансформации може да се изобразят графично като прекараме осите x' и t', както това е показано на фиг. 5.1 (вж. гл. 17, т. I, фиг. 17.2). Вие виждате, че в системата $x'-t'$ точките с равни фази[1] се намират по оста t' на други разстояния, така че честотата на временните изменения вече е друга. Освен това фазата се мени и по x', т. е. амплитудата на вероятността трябва да бъде функция и на x'.

При трансформациите на Лоренц за скорост v на движение, например по отрицателната посока на оста x, времето t е свързано с t' чрез формулата

$$t = \frac{t' - x'v/c^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$$

и сега амплитудата на вероятността ще се мени така:

$$e^{-(i/\hbar)\,E_0 t} = e^{-(i/\hbar)\,(E_0 t'/\sqrt{1-v^2/c^2}) - (E_0 v x'/c^2\sqrt{1-v^2/c^2})}.$$

В системата x', y', z', t' тя се изменя както в пространството, така и във времето. Ако запишем амплитудата във вида

$$e^{-(i/\hbar)\,(E_p' t' - p' x')},$$

вижда се, че

$$E_p' = \frac{E_0}{\sqrt{1-v^2/c^2}}.$$

Това е енергията, изчислена по класическите правила, на частица с енергия на покой E_0 и движеща се със скорост v; $p' = E_p' \frac{v}{c^2}$ е съответно импулсът на частицата.

Вие знаете, че ако $x_\mu = (t, x, y, z)$ и $p_\mu = (E, p_x, p_y, p_z)$ са четиримерните вектори, а $p_\mu x_\mu = Et - \mathbf{p}.\mathbf{x}$ е скаларен инвариант. В система на покой $p_\mu x_\mu = Et$; следователно при преминаване в друга координатна система трябва да заменим Et с

$$E't' - \mathbf{p}' \cdot \mathbf{x}'.$$

Така амплитудата на вероятността за частица с импулс $\mathbf{p}$ ще бъде пропорционална на

$$e^{-(i/\hbar)\,(E_p\, t - p\ \mathbf{x})} \tag{5.5}$$

където E_p е енергията на частицата с импулс $\mathbf{p}$, т. е.

$$E_p = \sqrt{(pc)^2 + E_0^2}, \tag{5.6}$$

[1] Предполагаме, че фазите трябва да имат една и съща стойност в съответните точки на двете координатни системи. Впрочем това е много деликатно място, понеже в квантовата механика фазите до голяма степен са произволни. За да оправдаем докрай това предположение, е необходимо по-точно разсъждение, което взема пред вид интерференцията на две или повече амплитуди.

а E_0, както и по-рано, е енергията на покой. В нерелативистични задачи можем да пишем

$$E_p = M_s c^2 + W_p, \tag{5.7}$$

където W_p е излишъкът (или недостигът) на енергия в сравнение с енергията на покой $M_s c^2$ на атома. В общия случай W_p трябва да включва и кинетичната енергия на атома, както и неговата енергия на свързване и възбуждане, които може да наречем „вътрешна“ енергия на атома. Тогава бихме писали

$$W_p = W_{\text{вътр.}} + \frac{p^2}{2M}, \tag{5.8}$$

а амплитудите биха имали вида

$$e^{-(i/\hbar)(W_p t - \text{p.x})}. \tag{5.9}$$

Искаме да направим всички пресмятания за нерелативистичния случай и затова ще използуваме амплитудите, записани във вида (5.9).

Забележете: релативистичната трансформация ни дава формула за изменението на амплитудата на движещ се в пространството атом, без да правим някакви добавъчни предположения. Вълновото число, както това следва от (5.9), ще бъде

$$k = \frac{p}{\hbar}, \tag{5.10}$$

а следователно дължината на вълната ще бъде

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p}. \tag{5.11}$$

Това е същата дължина на вълната, която по-рано използувахме за частица с импулс p. Това е и пътят, по който за пръв път дьо Бройл достигна до тази формула. *Честотата* на изменение на амплитудата за движеща се частица, както и по-рано, ще се дава с

$$\hbar\omega = W_p. \tag{5.12}$$

Абсолютната стойност на (5.9) е равна на единица, така че за частица, движеща се с *определена енергия*, вероятността тя да се открие някъде е една и съща и не се мени с времето. (Важно е да се отбележи, че амплитудата е *комплексна* вълна. Ако ние използувахме реална синусоида, квадратът ѝ би се менил от точка в точка, което не би било вярно.)

Разбира се, ние знаем, че се случва частиците да се движат и така, че вероятността зависи от положението и се изменя с времето. Как трябва да описваме тези случаи? Това можем да направим, като разглеждаме амплитуди, представляващи суперпозиции на две или повече състояния с определена енергия. Такава ситуация вече обсъждахме в гл. 48 (т. I), при това именно за амплитуди на вероятности! Тогава установихме, че сумата на две амплитуди с различни вълнови числа k (т. е. импулси) и честоти ω (т. е. енергии) водят до интерференчни биения и затихвания, така че квадратът на амплитудата се мени в пространството и времето. Освен това тези биения се движат с т. нар. „групова скорост“, определена по формулата

$$v_{\text{гр}} = \frac{\Delta\omega}{\Delta k},$$

където Δk и $\Delta\omega$ са разликите във вълновите числа и честоти на вълните. В по-сложни вълни, съставени от много амплитуди с близки честоти, груповата скорост е равна

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk}. \tag{5.13}$$

Понеже $\omega = \frac{E_p}{\hbar}$, $k = \frac{p}{\hbar}$, то

$$v_{\text{гр}} = \frac{dE_p}{dp}. \tag{5.14}$$

Но от (5.6) следва, че

$$\frac{dE_p}{dp} = c^2 \frac{p}{E_p}, \tag{5.15}$$

а понеже $E_p = Mc^2$, то

$$\frac{dE_p}{dp} = \frac{p}{M}. \tag{5.16}$$

Това е точно класическата скорост на частицата. Даже като прилагаме нерелативистични изрази, ще получим

$$\omega = \frac{W_p}{\hbar}, \qquad k = \frac{p}{\hbar}$$

и

$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{dW}{dp} = \frac{d}{dp}\left(\frac{p^2}{2M}\right) = \frac{p}{M}, \tag{5.17}$$

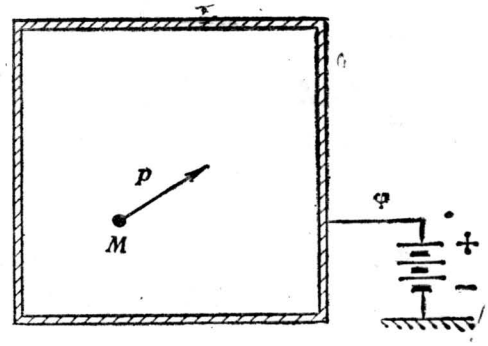
т. е. пак класическата скорост.

Следователно полученият от нас резултат гласи, че ако имаме няколко амплитуди за чисти енергетични състояния с почти еднакви енергии, тяхната интерференция води до пакети от вероятности, които се движат в пространството със скорости, равни на скоростите на класическите частици с такива енергии. Необходимо е да отбележим обаче, че когато събираме амплитуди с различни вълнови числа, за да получим пакети, отговарящи на движението на частиците, ние внасяме нещо ново — нещо, което не следва от теорията на относителността. Вече обяснихме как се изменя амплитудата на неподвижна частица, а след това изведохме тази зависимост и за движеща се частица. Но от тези разсъждения *не сме в състояние* да изведем какво ще стане, ако имаме *две* вълни, движещи се с различни скорости. Ако спрем едната от тях, не ще бъдем в състояние да спрем другата. Така че налага се тихомълком да добавим *още една хипотеза*: освен че (5.9) е *възможно* решение, ще допускаме, че тази система може да има и решения със всевъзможни импулси p, като различните членове интерферират помежду си.

5-3. Потенциална енергия; запазване на енергията

А сега искаме да разгледаме случая, когато енергията на частицата може да се изменя. Да започнем с частица, която се движи в силово поле, зададено с потенциал. Да разгледаме отначало влиянието на постоянен потенциал. Нека имаме голяма метална кутия, заредена до някакъв електростатичен потенциал φ (фиг. 5.2). Ако в кутията има зареден обект, неговата потенциална енергия ще бъде $g\varphi$; това число ще означим с V. По условие V никак не зависи от положението на самия обект. От наличието на потенциал няма да настъпят никакви физически изменения вътре в кутията, понеже постоянният потенциал не влияе върху това, какво става в кутията. Следователно оттук не е възможно да изведем закона, по който се мени амплитудата. Можем само да правим догадки. Ето и правилният отговор — той изглежда така, какво и трябваше да очакваме: във формулата за амплитудата вместо енергията, трябва да поставим сумата от потенциалната енергия V и енергията E_p, която самата е сума от вътрешната и кинетичната енергия. Тогава амплитудата ще бъде пропорционална на

$$e^{-(i/\hbar)\,[\,(E_p+V)t - \mathbf{p}\,\mathbf{x}]}. \tag{5.18}$$



Фиг. 5.2. Частица с маса M и импулс p в област с постоянен потенциал

Общият принцип се състои в това, че като коефициент пред t, който можем да назовем ω, винаги стои *пълната енергия* на системата: вътрешната енергия („енергия на масата") плюс кинетичната енергия, плюс потенциалната енергия

$$\hbar\omega = E_p + V. \tag{5.19}$$

Или в нерелативистичния случай:

$$\hbar\omega = W_{\text{вътр.}} + \frac{p^2}{2M} + V. \tag{5.20}$$

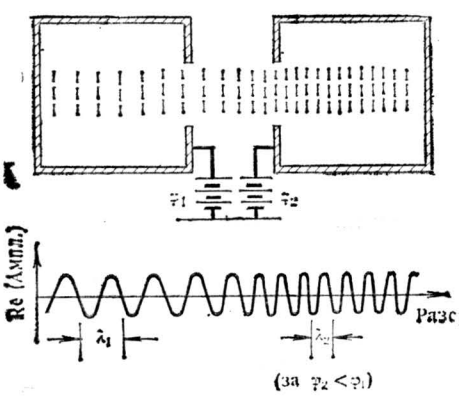
А какво да кажем за физическите явления вътре в кутията? Какво ще се получи, ако физическите състояния са не едно, а няколко? В амплитудата на всяко състояние ще влезе един добавъчен множител

$$e^{-(i/\hbar)Vt}.$$

Това е еквивалентно на преместване на нулата на нашата енергетична скала. Получава се еднакво преместване на фазите на всички амплитуди, а това, както по-рано се убедихме, не изменя вероятностите. Всички физически явления остават същите. (Предполагаме, че става дума за различни състояния на един и същ зареден обект, така че за тях $g\varphi$ е еднакво. Ако обектът би могъл да мени заряда си, преминавайки от едно състояние в друго, бихме достигнали до съвършено друг резултат, но запазването на заряда ни предпазва от това.)

Досега допускането ни се съгласуваше с това, което би трябвало да очакваме при едно просто отместване на нулата на енергията. Но ако то в действителност е справедливо, тогава трябва да бъде изпълнено и за потенциална енергия, която не е константа. В общия случай V може да се мени произволно във времето и в пространството и окончателният резултат за амплитудата трябва да се изразява с езика на диференциалните уравнения. Обаче ние не желаем веднага да разглеждаме общия случай, а ще се ограничим с някои общи представи за това, което става. Така че засега ще разглеждаме само потенциал, който е постоянен с времето и слабо се мени в пространството. Тогава можем да сравним класическите и квантовите представи помежду им.

Да предположим, че се занимаваме със случая, показан на фиг. 5.3, където две кутии се поддържат при постоянни потенциали φ_1 и φ_2, а потенциалът в областта между тях плавно се мени от φ_1 към φ_2. Да предположим, че за някаква частица съществува амплитуда да се окаже в една от тези области. Да допуснем, че импулсът на частиците е достатъчно голям, така че във всяка най-малка област, в която се нанасят много дължини на вълната, потенциалът е почти постоянен. Тогава сме в правото си да считаме, че във всяка част на пространството амплитудата изглежда както (6.18), само V за всяка част от пространството ще бъде различно.



Фиг. 5.3. Амплитудата за това, частица да преминава от един потенциал към друг

Да разгледаме частния случай, когато $\varphi_1 = 0$, така че потенциалната енергия в първата кутия е равна на нула, докато във втората кутия потенциалната енергия е отрицателна и в нея една класическа частица ще притежава голяма кинетична енергия. В класическия случай частицата във втората кутия ще се движи по-бързо и следователно ще има, по-голям импулс. Да видим как се получава това въз основа на квантовата механика.

При направените от нас предположения, в първата кутия амплитудата трябва да бъде пропорционална на

$$e^{-(i/\hbar)\left[\left(W_{\text{вътр.}} + \frac{p_1^2}{2M} + V_1\right)t - p_1 x\right]}, \tag{5.21}$$

а във втората

$$e^{-(i/\hbar)\left[\left(W_{\text{вътр.}} + \frac{p_2^2}{2M} + V_2\right)t - p_2 x\right]}. \tag{5.22}$$

(Ще считаме, че вътрешната енергия не се изменя, а остава и в двете области постоянна). Въпросът е следният: как тези две амплитуди се свързват една с друга в областта между кутиите?

Ще считаме, че потенциалите са постоянни с времето. След това ще предположим, че изменението на амплитудите (т. е. техните фази) става навсякъде с една и съща *честота*, защото в пространството между двете кутии няма нищо, което да зависи от времето. Ако в пространството не се изменя нищо, може да се счита, че вълната в една от областите „генерира" спомагателни вълни в цялото пространство, като тези вълни са с еднаква честота и освен това подобно на светлинни вълни, преминаващи през неподвижно вещество, не менят честотата си. Ако честотите в (5.21) и (5.22) са еднакви, трябва да е изпълнено равенството

$$W_{\text{вътр.}}+\frac{p_1^2}{2M}+V_1=W_{\text{вътр.}}+\frac{p_2^2}{2M}+V_2. \qquad (5.23)$$

От двете страни на това равенство стоят пълните класически енергии, така че всъщност (5.23) е твърдение за запазване на енергията. С други думи, класическото твърдение за запазване на енергията е напълно равнозначно на квантово-механичното твърдение, че честотите на частиците навсякъде са еднакви, ако условията не се менят с времето. Всичко това е в съгласие с основното равенство $\hbar\omega=E$.

В частния случай, когато $V_1=0$, а V_2 е отрицателно, (5.23) означава, че p_2 е по-голямо от p_1, т. е. в областта 2 вълните имат по-голяма дължина. Повърхностите с равни фази са показани на фиг. 5.3 с пунктир. Там е начертана и графика на реалната част на амплитудата, откъдето също се вижда как намалява дължината на вълната при преминаването от областта 1 в областта 2. Груповата скорост на вълната е равна на p/M; тя също расте, както трябваше и да се очаква от класическия закон за запазване на енергията, понеже тя просто съвпада с (5.23).

Интерес представлява частният случай, когато V_2 е толкова голямо, че V_2-V_1 надвишава $p_1^2/2M$. Тогава p_2^2, което се дава с формулата

$$p_2^2=2M\left(\frac{p_1^2}{2M}-V_2+V_1\right), \qquad (5.24)$$

става *отрицателно*. А това означава, че p_2 е имагинерно, да кажем ip'. Класически бихме казали, че частицата никога няма да попадне в областта 2, защото не ѝ достига енергия, за да преодолее потенциалния „хълм". Но в квантовата механика амплитудата, както и по-рано, се дава от уравнение (5.22); нейното изменение в пространството става по закона

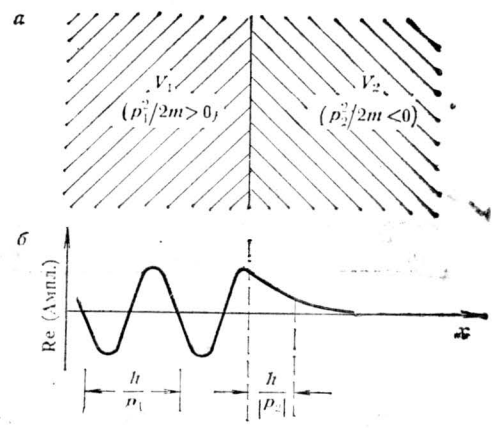
$$e^{(i/\hbar)\ p_2 x}.$$

Но понеже p_2 е имагинерно число, пространствената зависимост се превръща в реална експонента. Ако например частицата се движи в посока $+x$, амплитудата ще се мени по закона

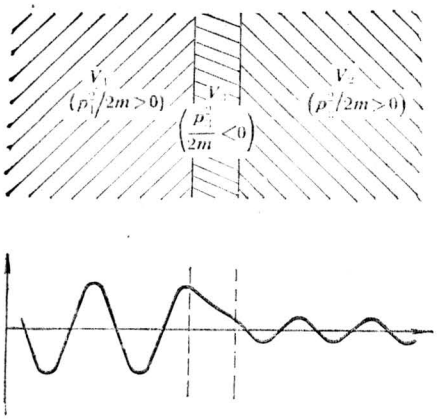
$$e^{-p'x/\hbar}. \qquad (5.25)$$

С нарастване на x амплитудата намалява.

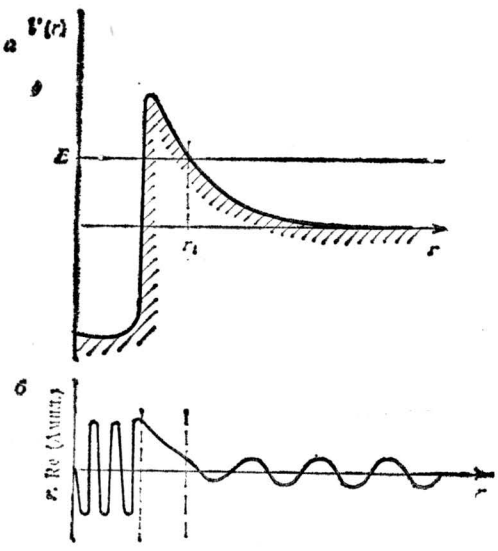
Нека разгледаме случая, когато двете области с различни потенциали са разположени много близко една до друга, така че потенциалната енергия внезапно се изменя от V_1 към V_2 (фиг. 5.4, *а*). Ако начертаем графиката на реалната част на амплитудата на вероятността, ще получим зависимостта, показана на фиг. 5.4, *б*. Вълната в областта 1 се опитва да проникне в областта 2, където амплитудата ѝ бързо спада. Съществува някаква вероятност частицата да бъде забелязана в областта 2, където в класическия случай тя *никога* не би могла да проникне, но амплитудата за това е много малка (освен в местата, близки до границата между двете области). Положението е подобно на онова, което имахме



Фиг. 5.4. Амплитудата за частица, приближаваща се към силно отклоняващ потенциал



Фиг. 5.5. Проникване на амплитуда през потенциален бариер



иг. 5.6. Потенциалът на α-частица в ядрото на урана (*а*) и качествен вид на амплитудата на вероятността (*б*)

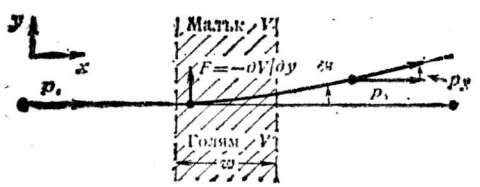
при пълното вътрешно отражение на светлината. Обикновено светлината не излиза извън пластинката, но все пак може да бъде забелязана и на разстояние една-две дължини на вълната извън повърхността.

Спомнете си, че ако поставите втора пластинка плътно до границата, от която светлината се отразява напълно, понякога и във втората среда все пак може да проникне малко светлина. Същото става и с частиците в квантовата механика. Ако имаме тясна област с някакъв висок потенциал V, така че класическата кинетична енергия там да е отрицателна, през такава област не може да проникне частица. Но в квантовата механика експотенциално намаляващата амплитуда може да проникне през нея, което дава една малка вероятност частицата да бъде забелязана от другата страна, където кинетичната енергия пак е положителна. Всичко това е показано на фиг. 5.5. Явлението се нарича „квантовомеханично проникване през потенциален бариер".

Преминаването на квантовомеханичната амплитуда през потенциален бариер обяснява (или описва) α-разпада на ядрото на урана. Зависимостта на потенциалната енергия на α-частиците от разстоянието до центъра е показана на фиг. 5.6, *а*. Ако се опитваме да изстреляме α-частица с енергия E в *ядрото* тя ще почувствува електростатично отблъскване от ядрения заряд z и по класическите закони такава частица не може да достигне до ядрото на разстояние, по-малко от r_1, при което пълната му енергия става равна на потенциалната енергия V. Но някъде вътре в ядрото потенциалната енергия ще се окаже доста по-ниска поради силното притегляне на късодействуващите ядрени сили. Как да обясним тогава появяването на α-частиците при радиоактивното разпадане, които първоначално се намират в ядрото, а после се оказват отвън с енергия E? Как тази частица, притежаваща от самото начало енергия E, се е промъкнала през потенциалния бариер? Схематично амплитудата на вероятността е показана на фиг. 5.6, *б*, макар в действителност експотенциалното спадане да е много по-силно от показаното на фигурата. Забележително е, че средното време на живот на α-частиците в ядрото на урана е $4^1/_2$ милиарда години, докато естествените трептения в ядрото са много по-бързи — от порядъка на 10^{22}! Как е възможно от 10^{-22} сек да се получи число от порядъка на 10^9 години? Отговорът е в това, че експонентата дава нечувано малък множител — от порядъка на 10^{-45}, което води и до тази много малка, но все пак напълно определена вероятност за преминаване през потенциалния бариер. Ако α-частицата вече е попаднала в ядрото, почти няма никаква амплитуда тя да се намери вън от него; но ако се вземат повече такива ядра и се почака по-дълго време, може да ви провърви и да видите как частицата ще изскочи навън.

5-4. Сили; класическо приближение

Да предположим, че частицата се движи през област, където има потенциал, който се изменя напречно на посоката на движение. Бихме изобразили този случай класически така, както е показано на фиг. 5.7. Ако частицата се движи по посока на оста x и попада в област, където потенциалът се изменя по посока на оста y, частицата ще получава напречно ускорение от силата $F=-\frac{\partial V}{\partial y}$. Ако силата се проявява само в ограничена област с ширина w, тя ще действува в течение на време $\frac{w}{v}$. Тогава частицата ще получи напречен импулс



Фиг. 5.7. Отклонение на частица от напречен градиент на потенциала

$$p_y = F\frac{w}{v},$$

а ъгълът на отклонение $\delta\theta$ ще бъде равен на

$$\delta\theta = \frac{p_y}{p} = \frac{Fw}{pv},$$

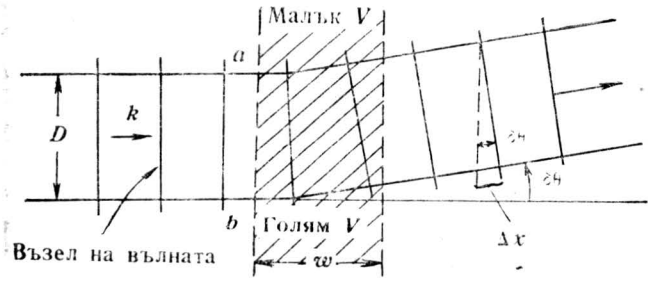
където p е началният импулс. Заместваики F с числото $-\frac{\partial V}{\partial y}$, получаваме

$$\delta\theta = -\frac{w}{pv}\cdot\frac{\partial V}{\partial y}. \tag{5.26}$$

Сега ни предстои да изясним ще успеем ли да получим този резултат при предположение, че вълните се подчиняват на уравнение (5.20). Ще разгледаме същото явление квантово-механично, предполагайки, че всички мащаби в него с много превишават дължината на вълната на нашите вероятностни амплитуди. Можем да считаме, че във всяка най-малка област амплитудите се менят, както

$$e^{-(i/\hbar)\left[\left(W+\frac{p^2}{2M}+V\right)t-p\cdot x\right]}. \tag{5.27}$$

Можем ли оттук да видим как ще се отклони частицата, ако V има напречен градиент? На фиг. 5.8 сме „нарисували“ как ще изглеждат вълните на амплитудите на вероятностите. Там сме



Фиг. 5.8. Амплитуда на вероятността в област с напречен потенциален градиент

начертали ред „възли на вълните“, които вие можете да си представите като повърхнини, където фазите на амплитудите са равни на нула. Във всяка неголяма област дължината на вълната (разстоянията между съседните вълни) е

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p},$$

където p е свързано с V чрез формулата

$$W+\frac{p^2}{2M}+V = \text{const}. \tag{5.28}$$

В областта, където V е голямо, p е малко, а дължините на вълните са големи. Затова посоката на линиите на възлите постепенно се изменя, както това е показано на рисунката.

За да определим изменението на наклона на линиите на възлите, нека предварително отбележим, че за двата пътя a и $б$ потенциалът се изменя с $\Delta V = \left(\frac{\partial V}{\partial y}\right)D$, а следователно се изменя и разликата Δp между импулсите. Тази разлика може да се получи от (5.28):

$$\Delta\left(\frac{p^2}{2M}\right) = \frac{p}{M}\,\Delta p = -\Delta V. \tag{5.29}$$

Затова и вълновото число $p/\hbar$ е различно за различни участъци от пътя, което означава, че фазите растат в тази посока с различни скорости. Разликата в скоростта на нарастване на фазите е $\Delta k = \frac{\Delta p}{\hbar}$ и насъбраната по целия път разлика във фазите ще бъде

$$\Delta(\text{фазите}) = \Delta k w = \frac{\Delta p}{\hbar}\,w = -\frac{M}{p\hbar}\,\Delta V w. \tag{5.30}$$

Това число показва с колко фазата по пътя $б$ „изпреварва“ фазата по пътя a в момента на излизане от ивицата. Но на изхода

наивицата такова изпреварване на фазите отговаря на изпреварване на възела на вълната с

$$\Delta x = \frac{\lambda}{2\pi}\,\Delta(\text{фазите}) = \frac{h}{p}\,\Delta(\text{фазите})$$

или

$$\Delta x = -\frac{M}{p^2}\,\Delta V w. \tag{5.31}$$

Като погледнем фиг. 5.8 виждаме, че новият фронт на вълната се е завъртял на

$$\Delta x = D\,\delta\theta, \tag{5.32}$$

така че ще имаме

$$D\,\delta\theta = -\frac{M}{p^2}\,\Delta V w. \tag{5.33}$$

А това съвпада с (5.26), ако заменим p/M с v, а $\frac{\Delta V}{D}$ с $\frac{\partial V}{\partial y}$.

Полученият резултат е верен само когато потенциалът се мени плавно и бавно — т. нар. *класическо приближение*. По такъв начин показахме, че при тези условия получаваме същото движение за частицата, каквото бихме получили и от $F = ma$, ако предположим, че потенциалът дава принос във фазата на амплитудата на вероятността, равен на $\frac{Vt}{\hbar}$. *В класическо приближение квантовата механика съвпада с Нютоновата механика.*

5-5. „Прецесия“ на частици със спин 1/2

Забележете, че ние не предполагаме нищо специално за потенциалната енергия, освен че първата ѝ производна дава сила. Например в опита на Щерн — Герлах енергията имаше вида $U = -\mu \cdot \mathbf{B}$; силата се получаваше от пространствената вариация на $\mathbf{B}$. Ако ни беше необходимо квантовомеханично описание на опита, би трябвало да кажем, че енергията на частиците в единия сноп се изменя в една посока, а в другия сноп — в противоположната посока. (Магнитната енергия U можехме да прибавим или към потенциалната енергия V или към „вътрешната“ енергия W; къде точно, няма значение. (Поради вариацията на енергията, вълните се пречупват, сноповете се изкривяват нагоре или надолу. (Вече знаем, че квантовата механика предсказва същото изкривяване, което следва и от класическата механика.)

От зависимостта на амплитудата от потенциалната енергия също следва, че за частица, намираща се в хомогенно магнитно поле с посока по оста z, амплитудата на вероятността трябва да се мени по закона

$$e^{-(i/\hbar)(-\mu_z B)t}.$$

(Това може да се вземе и като определение за μ_z.) С други думи, ако за време τ поставим частица в хомогенно магнитно поле B, нейната амплитуда на вероятността ще се умножи с

$$e^{-(i/\hbar)(-\mu_z B)\tau},$$

в повече от това, което би било без магнитно поле. Понеже за частица със спин 1/2, μ_z може да бъде равно на плюс или минус някое число, например μ, то за двете мислими състояния в хомогенно поле фазата ще се мени с еднаква скорост и противоположни посоки. Амплитудите ще се умножат с

$$e^{\pm(i/\hbar)\mu B \tau}. \tag{5.34}$$

Този резултат води до интересни следствия. Нека частица със спин 1/2 се намира в някакво състояние, което не е нито чисто състояние със спин, насочен нагоре, нито чисто състояние с насочен надолу спин. Можем да го опишем с амплитудите за пребиваване в тези две състояния. Но в магнитно поле фазите на

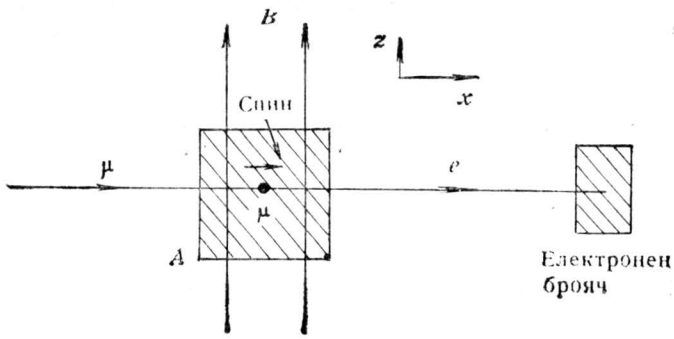
тези състояния ще започнат да се менят с различни скорости. И ако сега поставим някакъв въпрос за амплитудата, отговорът ще зависи от това, колко време частицата е прекарала в това поле.

Като пример да разгледаме разпадането на мюона в магнитно поле. При раждането си мюоните (в резултат от разпадането на π-мезони) са поляризирани (т. е. те се раждат с предпочитани посоки на спина). Мюоните от своя страна също се разпадат (средно за време 2,2 μs, изпускайки електрон и двойка неутрино

$$\mu \rightarrow e + \nu + \nu.$$

Оказва се, че при такова разпадане (поне при големи енергии) електроните излитат предимно в посока, противоположна на посоката на спина на мюона.

Да предположим, че имаме експериментално устройство, показано на фиг. 5.9: поляризираните мюони влизат отляво в блока



Фиг. 5.9. Опит с разпадащ се мюон

вещество A, където се спират, и малко по-късно се разпадат. Появяващите се при това електрони излизат във всички възможни посоки. Сега нека си представим, че всички мюони навлизат в блока A с еднаква посока на спина: в посока на оста x. Без магнитно поле би се наблюдавало някакво ъглово разпределение на посоките на излизащите електрони; ние обаче искаме да знаем как ще се измени това разпределение при наличие на магнитно поле. Може да се очаква то да се мени с времето. Резултатът от опита ще бъде определен, ако намерим за всеки момент амплитудата за откриване на мюона в състояние със спин $(+x)$.

Тази задача може да се формулира и по следния начин: нека е известно, че в момента $t=0$ спинът на мюона е насочен в посока $+x$; каква е амплитудата за това, че в момент τ той ще се окаже пак в същото състояние? И макар да не знаем правилата за поведението на частица със спин 1/2 в магнитно поле с посока, перпендикулярна на посоката на спина, ние все пак знаем какво става, когато спинът е насочен нагоре или надолу — тогава техните амплитуди се умножават с израза (5.34). В такъв случай трябва да изберем представяне, в което базисните състояния да бъдат с посока на спина нагоре или надолу спрямо оста z (т. е. спрямо посоката на магнитното поле). И вече всеки проблем може да се изрази чрез тези амплитуди.

Нека $|\psi(t)>$ да представя състоянието на мюона. Когато той влиза в блока A, неговото състояние ще бъде $|\psi(0)>$, а ние искаме да знаем $|\psi(\tau)>$ в по-късния момент τ. Ако означим двете базисни състояния с $(+z)$ и $(-z)$, тогава са ни известни амплитудите $<+z|\psi(0)>$ и $<-z|\psi(0)>$ — те са известни, защото знаем, че $|\psi(0)>$ представлява състояние със спин в посоката $+x$. От предишната глава следва, че тези амплитуди са равни на[1]

$$<+z|+x> = C_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad (5.35)$$

[1] Ако сте пропуснали гл. 4, можете да считате (5.35) като неизведено правило. По-късно, в гл. 8 ще разгледаме прецесията на спина подробно и тези амплитуди ще бъдат получени.

и

$$<-z|+x>=C_-=\frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Те се оказват еднакви. Понеже се отнасят за случая $t=0$, нека ги означим $C_+(0)$ и $C_-(0)$.

По-нататък ние знаем какво става с тези амплитуди. От (5.34) следва

$$C_+(t)=C_+(0)e^{-(i/\hbar)\mu Bt}$$

и

$$C_-(t)=C_-(0)e^{+(i/\hbar)\mu Bt}. \qquad (5.36)$$

Но щом знаем $C_+(t)$ и $C_-(t)$, вече имаме всичко, за да знаем условията в момента t. Остава да преодолеем още едно затруднение: необходима ни е вероятността за това, спинът (в момент t) да се окаже насочен в посока $+x$. Нашите общи правила дават отговор и на този въпрос. Можем да напишем, че амплитудата за пребиваване в състояние $(+x)$ в момент t (означавайки я с $A_+(t)$ е

$$A_+(t)=<+x|\psi(t)>=$$
$$=<+x|+z><+z|\psi(t)>+<+x|-z><-z|\psi(t)>$$

или

$$A_+(t)=<+x|+z>C_+(t)+<+x|-z>C_-(t). \qquad (5.37)$$

Използувайки пак резултата от предишната глава (или по-точно равенството $<\varphi|\chi>=<\chi|\varphi>^*$ от гл. 3), можем да напишем

$$<+x|+z>=\frac{1}{\sqrt{2}},\qquad <+x|-z>=\frac{1}{\sqrt{2}}.$$

По такъв начин в (5.37) всичко е известно. Получаваме:

$$A_+(t)=\frac{1}{2}e^{(i/\hbar)\mu Bt}+\frac{1}{2}e^{-(i/\hbar)\mu Bt}$$

или

$$A_+(t)=\cos\frac{\mu B}{\hbar}t.$$

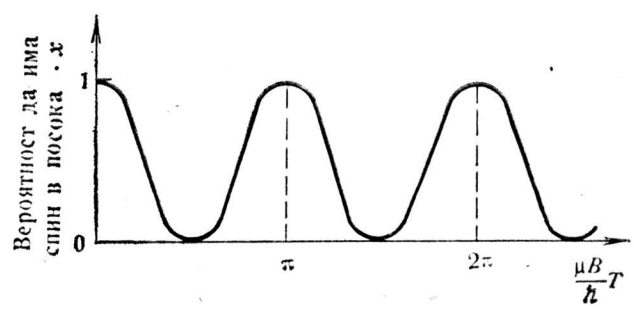
Поразително прост резултат! Забележете: отговорът съвпада с това, което очакваме за $t=0$. Получаваме $A_+(0)=1$ и това е напълно правилно, защото по начало предполагахме, че при $t=0$ мюонът е в състояние $(+x)$.

Вероятността за това в момент t мюонът да се окаже в състояние $(+x)$, ще бъде $(A_+)^2$, т. е.

$$P_+=\cos^2\frac{\mu Bt}{\hbar}.$$

Вероятността се изменя от нула до единица, както това е показано на фиг. 5.10. Забележете, че вероятността става отново единица при $\mu Bt/\hbar=\pi$ (*а не при* 2π). Поради това, че косинусът е повдигнат в квадрат, вероятността се повтаря с честота $\frac{2\mu B}{\hbar}$.

И така видяхме, че вероятността да „хванем" родения при разпада електрон в детектора, както това е показано на фиг. 5.9,



Фиг. 5.10. Зависимостта от времето за това, частица със спин $^1/_2$ да се окаже в състояние $(+)$ спрямо оста x

се изменя периодично с големината на интервала време, в течение на който мюонът е престоявал в магнитното поле. Именно по такъв начин е бил измерен магнитният момент на мюона.

С този метод могат да се изследват и други проблеми, отнасящи се до разпада на мюона. Например, как зависи от времето вероятността за регистриране на електрона в посока $+y$ (под ъгъл 90° спрямо x). Ако вие решите тази задача, ще видите, че вероятността ще се изменя като $\cos^2\left\{\left(\mu Bt/\hbar\right)-\frac{\pi}{4}\right\}$; тя се колебае със същия период, но достига максимум с четвърт цикъл закъснение, когато $\frac{\mu Bt}{\hbar}=\frac{\pi}{4}$. В действителност става следното: с течение на времето мюонът преминава последователно през всички състояния, отговарящи на пълната поляризация в посока, която непрекъснато се върти около оста z. Това може да се опише, като кажем, че *спинът прецисира* с честота

$$\omega_p=\frac{2\mu B}{\hbar}. \tag{5.38}$$

Вече трябва да ви е ясно в каква форма се проявява квантово-механичното поведение, когато го описваме във времето.

6

Хамилтонова матрица

6-1. Амплитуди и вектори

6-2. Разлагане на векторите на състояния

6-3. Какви са базисните състояния на света?

6-4. Как се изменят състоянията с времето

6-5. Хамилтонова матрица

6-6. Молекула на амоняка

6-1. Амплитуди и вектори

Преди да пристъпим към разглеждането на основната тема на тази глава, бихме искали да изложим някои математически идеи, които често се срещат в книгите по квантова механика. Тяхното познаване ще улесни четенето на други книги или статии по този предмет. Първата идея — това е тясната математическа аналогия между уравненията на квантовата механика и формулите за скаларни произведения на векторите. Вие помните, че ако χ и φ са две състояния, амплитудата за някакъв процес да започне от φ и да завърши в χ, може да бъде записана като сума (по пълната съвкупност на базисните състояния) от амплитудите за преход от φ в едно от базисните състояния и след това от това базисно състояние в крайното χ:

$$<\chi\,|\,\varphi>=\sum_i <\chi\,|\,i><i\,|\,\varphi>. \tag{6.1}$$

Ние получихме тази формула с помощта на прибора на Щерн—Герлах, а сега ви напомняме, че за това съвсем не са необходими каквито и да било прибори. Уравнение (6.1) представлява математически закон, който е верен винаги, независимо от това има ли филтриращо устройство, или не. Въобще можем да разглеждаме (6.1) като формула за амплитудата $<\chi\,|\,\varphi>$.

Да съпоставим (6.1) с формулата за скаларно произведение на два вектора **B** и **A**. Ако **B** и **A** са обикновени тримерни вектори, скаларното произведение може да се напише във вида

$$\sum_i (\mathbf{B}\,.\,\mathbf{e}_i\,)(\mathbf{e}_i\,.\,\mathbf{A}), \tag{6.2}$$

където e_i са трите единични вектора на осите x, y и z. Така че $\mathbf{B}.\mathbf{e}_1$ е еквивалентно на B_x, $\mathbf{B}.\mathbf{e}_2$ — на B_y и т. н. Следователно (6.2) е еквивалентно на

$$B_xA_x+B_yA_y+B_zA_z,$$

а това представлява скаларното произведение **B** . **A**.

Сравнявайки (6.1) с (6.2), забелязваме следната аналогия: състоянията χ и φ съответствуват на двата вектора **A** и **B**, а базисните състояния i отговарят на единични вектори $\mathbf{e}_i$, към които отнасяме всички останали вектори. Вие знаете, че всеки вектор може да бъде представен като линейна комбинация на трите „базисни вектора“ $\mathbf{e}_i$. Освен това, ако са ви известни коефициентите пред всеки от „базисните вектори“ в тази комбинация, т. е. трите му компоненти, вие вече знаете всичко за този вектор. Точно по същия начин всяко квантово-механично състояние може да бъде описано напълно чрез амплитудите $<i\,|\,\varphi>$ за преход в базисните състояния, така че ако са известни тези коефициенти, вие ще знаете всичко, което може въобще да се знае за това състояние. Поради тази тясна аналогия „състоянията“ често се наричат „вектори на състоянията“.

Щом базисните вектори $\mathbf{e}_i$ са перпендикулярни помежду си, в сила е съотношението

$$\mathbf{e}_i\,.\,\mathbf{e}_j=\delta_{ij}. \tag{6.3}$$

Това съответствува на съотношението (3.25) между базисните състояния

$$<i|j>=\delta_{ij}. \tag{6.4}$$

Сега вече е ясно защо казваме, че базисните състояния i са „ортогонални помежду си".

Съществува и една малка разлика между (6.1) и скаларното произведение. За векторите на състоянията

$$<\varphi|\chi>=<\chi|\varphi>^*, \tag{6.5}$$

докато във векторната алгебра

$$\mathbf{A}\,.\,\mathbf{B}=\mathbf{B}\,.\,\mathbf{A}\,.$$

В квантовата механика с нейните комплексни величини ние сме длъжни да следим за реда на множителите, докато при скаларното произведение това няма значение.

Сега да разгледаме векторното уравнение

$$\mathbf{A}=\sum_i \mathbf{e}_i\,(\mathbf{e}_i\,.\,\mathbf{A})\,; \tag{6.6}$$

то е малко необикновено, но е вярно и означава същото, което и

$$\mathbf{A}=\sum_i A_i\,.\,\mathbf{e}_i = A_x\,.\,\mathbf{e}_x+A_y\,.\,\mathbf{e}_y+A_z\,.\,\mathbf{e}_z\,. \tag{6.7}$$

Забележете, че в (6.6) участвува величина, *различна* от скаларното произведение. Скаларното произведение е *число*, а (6.6) е *векторно* уравнение. Един от забележителните прийоми на векторния анализ е да се извлече от уравненията абстрактната идея за *вектора*. По същия начин, можем да опитаме да абстрахираме от уравнение (6.1) това, което в квантовата механика представлява аналог на „вектора". И това наистина може да се направи. Да махнем $<\chi|$ от двете страни на (6.1) и напишем уравнението (не се плашете — това са само означения и след две минути ще разберете какво означават тези символи):

$$|\varphi>=\sum_i |i><i|\varphi>. \tag{6.8}$$

Скобката $<\chi|\varphi>$ е съставена от две половини: втората половина $|\varphi>$ се нарича *кет*, а първата $<\chi|$ — *бра* (поставени една до друга те образуват: бра-кет = bracket, скоб-ка = скобка, означения, предложени от Дирак). Полусимволите $<\chi|$ и $|\varphi>$ наричат също *вектори на състоянията*. Те не са числа, докато за нас е необходимо резултатите от изчисленията да се изразяват с числа; подобни „незавършени" величини представляват междутъчни стъпки в пресмятанията.

Досега изразявахме всички наши резултати с числа. Как се изхитрявахме да избягваме векторите? Интересно е, че даже в обикновената векторна алгебра *може да се направи* така, че във всички уравнения да участвуват само числа. Например вместо векторното уравнение

$$\mathbf{F}=m\mathbf{a}$$

винаги може да се напише

$$\mathbf{C}\,.\,\mathbf{F}=\mathbf{C}\,.\,(m\mathbf{a}).$$

Полученото уравнение, свързващо скаларни произведения, е вярно за всеки вектор $\mathbf{C}$. Но щом е вярно за всяко $\mathbf{C}$, то едва ли има смисъл въобще да се пише това $\mathbf{C}$!

Сега да се върнем към (6.1). Това уравнение е вярно за *всяко* χ. Следователно за съкратено записване на това уравнение трябва просто да *махнем* χ и вместо (6.1) да напишем (6.8). И сега уравнението ще ни даде същата информация, ако винаги помним, че за да „довършим" трябва „да умножаваме отляво на . . . ", т. е. просто да дописваме някакво $<\chi|$ отляво на двете страни на това уравнение. Така че (6.8) означава същото, което

и (6.1) — ни повече, ни по-малко. Ако предпочитате числа, заместете това $<\chi|$, което ви е необходимо.

Може би вече „взехте на мушка“ и φ? Щом (6.8) е вярно за *всяко* φ, защо пък да не премахнем и него? И наистина Дирак предлага да се абстрахираме и от него, така че остава само

$$| = \sum_i | i><i |. \tag{6.9}$$

Ето какъв е великият закон на квантовата механика! Той твърди, че ако вие поставите каквито и да са две състояния χ и φ от двете страни на това „уравнение“, *ще получавате* уравнението (6.1). Изобщо казано, уравнение (6.9) не е много полезно, но напомня, че то е изпълнено за кои и да са две състояния.

6-2. Разлагане на векторите на състояния

Да разгледаме още веднаж уравнение (6.8); то може да бъде интерпретирано по следния начин. Всеки вектор на състояние $|\varphi>$ може да бъде представен като линейна комбинация от съвкупност от базисни „вектори“ с подходящи коефициенти, ако щете, като суперпозиция на „единични вектори“ в подходяща пропорция. За да подчертаем, че коефициентите $<i|\varphi>$ са обикновени комплексни числа, нека напишем

$$<i|\varphi> = C_i .$$

Тогава (6.8) ще съвпада с

$$|\varphi> = \sum_i | i> C_i . \tag{6.10}$$

Подобно уравнение може да се напише и за всеки друг вектор на състоянието, да кажем $|\chi>$, разбира се, с други коефициенти, например D_i. Ще имаме

$$|\chi> = \sum_i | i> D_i , \tag{6.11}$$

където D_i са амплитудите $<i|\chi>$.

Да си представим, че сме започнали с това, че в (6.1) сме се абстрахирали от φ. Тогава бихме имали

$$<\chi| = \sum <\chi| i><i| . \tag{6.12}$$

Като си спомним, че $<\chi| i> = <i|\chi>^*$, можем да напишем

$$<\chi| = \sum_i D_i^* <i| . \tag{6.13}$$

Интересно е следното: за да получим отново $<\chi|\varphi>$, можем просто да *умножим* (6.13) и (6.10). Само че като вършим това, трябва да бъдем внимателни към индексите на сумиране, защото в двете уравнения те са различни. Отначало да препишем (6.13)

$$<\chi| = \sum_j D_j^* <j| .$$

Това не изменя нищо. Обединявайки с (6.10), получаваме

$$<\chi|\varphi> = \sum_{kj} D_j^* <j| i> C_i . \tag{6.14}$$

Понеже $<j| i> = \delta_{ij}$, то в сумата остава само членът $i=j$. Получаваме

$$<\chi|\varphi> = \sum_i D_i^* C_i , \tag{6.15}$$

където, вие си спомняте, че $D_i^* = <i|\chi>^* = <\chi| i>$, а $C_i = <i|\varphi>$.

Пак сме свидетели на тясната аналогия със скаларното произведение

$$\mathrm{A}\ .\ \mathrm{B}=\sum_i A_i\, B_i\ .$$

Единствената разлика е, че D_i трябва да бъде комплексно спрегнато. Значи (6.15) твърди, че ако разложим векторите на състоянията $<\chi|$ и $|\varphi>$ по базисните вектори $<i|$ и $|i>$, амплитудата за преход от φ в χ ще се дава един вид от скаларното произведение (6.15). А това е просто (6.1), записано с други символи. Както виждате, ние се движим в кръг като усвояваме нови символи.

Може би заслужава да се подчертае, че докато пространствените тримерни вектори се изразяват с три ортогонални вектора, базисните вектори $|i>$ на квантово-механичните състояния трябва да пробягват цялата съвкупност, отговаряща за дадената задача. В зависимост от това може да имаме две, три, пет или безкрайно много базисни състояния.

Разгледахме също какво става, когато частиците преминават през някакъв прибор. Ако имаме частици в определено състояние φ, и ги пропуснем през прибор, а после извършим измерване, за да установим дали те се намират в състояние χ, резултатът ще се описва от амплитудата

$$<\chi|\,A\,|\varphi>\ . \tag{6.16}$$

Такъв символ няма близък аналог във векторната алгебра. (Той е по-близък до тензорната алгебра, но тази аналогия не е толкова полезна. В гл. 3 [формула (3.32)] видяхме, че (6.16) може да се запише така:

$$<\chi|\,A\,|\varphi>=\sum_{ij}<\chi|\,i><i|\,A\,|j><j|\,\varphi>. \tag{6.17}$$

Това представлява пример за двукратно прилагане на основното правило (6.9).

Знаем също, че ако след прибора A поставим друг прибор B, можем да напишем

$$<\chi|\,BA\,|\varphi>=\sum_{ijk}<\chi|\,i><i|\,B\,|j><j|\,A\,|k><k|\,\varphi>. \tag{6.18}$$

Това следва направо от предложения от Дирак метод за записване на уравнение (6.9). Спомнете си, че между B и A винаги можете да поставите чертичка (|), която има смисъл на множител единица.

Между другото, имайки пред вид уравнение (6.17), можем да разсъждаваме и по друг начин. Да предположим, че разглеждаме частица, попаднала в прибора A в състояние φ и излизаща в състояние ψ. Можем да си зададем въпроса: може ли да се намери състояние ψ, така че амплитудата за преход от ψ към χ тъждествено да съвпада с $<\chi|\,A\,|\varphi>$? Отговорът е утвърдителен. Всъщност искаме (6.17) да бъде заменено с

$$<\chi|\,\psi>=\sum_i<\chi|\,i><i|\,\psi>\ . \tag{6.19}$$

Разбира се, това може да се постигне, ако вземем

$$<i|\,\psi>=\sum<i|\,A\,|j><j|\,\varphi>=<i|\,A\,|\varphi>. \tag{6.20}$$

което определя и ψ. „Но то не определя ψ — ще кажете вие, — то определя само $<i|\,\psi>$". „Но в действителност $<i|\,\psi>$ *все пак определя* ψ; щом имаме всички коефициенти, свързващи ψ с базисните състояния i, ψ е определено еднозначно. И наистина можем да запишем (6.20) във вида

$$<i|\,\psi>=\sum_j<i|\,j><j|\,A\,|\varphi>\ . \tag{6.21}$$

И понеже това уравнение е вярно при всички i, можем да напишем

$$|\psi\rangle = \sum_j |j\rangle\langle j|A|\varphi\rangle. \tag{6.22}$$

Сега вече можем да заявим: „Състоянието ψ е онова, което се получава, ако първоначалното състояние е било φ и след това частицата е преминала през прибора A.“

Още един последен пример за полезни преобразования. Нека пак започнем с (6.17). Щом това уравнение е в сила при всички χ и φ, можем да ги съкратим. Получаваме[1]

$$A = \sum |i\rangle\langle i|A|j\rangle\langle j| . \tag{6.23}$$

Какво означава това уравнение? Само това, което се получава, когато върнем на техните места φ и λ. В такъв вид това уравнение е „недовършено“ и непълно. Ако го умножим отдясно с $|\varphi\rangle$, ще получим

$$A|\varphi\rangle = \sum_{ij} |i\rangle\langle i|A|j\rangle\langle j|\varphi\rangle, \tag{6.24}$$

а това е пак уравнение (6.22). Всъщност бихме могли просто да махнем от (6.22) всички j-та и да напишем

$$|\psi\rangle = A|\varphi\rangle. \tag{6.25}$$

Символът A не е нито амплитуда, нито вектор, а нещо ново, величина от особен вид, наречена *оператор*. Това е „нещо“, което „действува“ върху състоянието, за да създаде ново състояние; уравнение (6.25) показва, че $|\psi\rangle$ е това, което се получава, когато A действува върху $|\varphi\rangle$. Трябва също да считаме това уравнение незавършено, открито, докато отляво не бъде умножено на някой „бра“-вектор, например на $\langle\chi|$, и да се получи

$$\langle\chi|\psi\rangle = \langle\chi|A|\varphi\rangle. \tag{6.26}$$

Разбира се, операторът A се описва напълно чрез матрицата от амплитуди $\langle i|A|j\rangle$; нея я записват още във вида A_{ij} — изразена чрез произволна съвкупност на базисните вектори. Всъщност всички тези математически означения не внасят нищо ново. Единствената причина, поради която ги разглеждаме е, че ще ги срещате в много книги и вие не трябва да се плашите от тези уравнения, написани в такъв непълен вид. Ако искате, можете да си допишете частите, които не достигат, и ще получите уравнение, което свързва числа. И то ще добие „приличен“ вид.

Освен това, както виждате, означенията „бра“ и „кет“ са много удобни. Преди всичко можем да означаваме състоянията, задавайки техните вектори на състояния. Когато искаме да означим състояние с определен импулс $\mathbf{p}$, ще казваме „състоянието $|\mathbf{p}\rangle$“. Или пък ще говорим за някакво произволно състояние $|\psi\rangle$. За еднообразие, говорейки за състояние, винаги ще употребяваме вектора „кет“ и ще пишем $|\psi\rangle$. (Разбира се, този избор е съвършено произволен; в еднаква степен бихме могли да употребим и „бра“-векторите $\langle\psi|$.

6-3. Какви са базисните състояния на света?

Видяхме, че всяко състояние в света може да бъде представено като суперпозиция (линейна комбинация с подходящи коефициенти) на базисните състояния. Сега имате право да попитате: *а какви* именно базисни състояния? Възможностите са много. Например, може да се вземе проекцията на спина върху посоката z или върху някоя друга посока. Съществуват много и най-различни *представяния* — аналогично на различните координатни системи, които се използуват за представянето на обикнове-

[1] Можете да възразите, че трябва да пишем не просто A, а $|A|$. Но това ще прилича много на символа „абсолютна стойност на A“. Затова обикновено чертичките се изпускат. Изобщо чертичката (|) има поведение на множител единица.

ните вектори. Възниква още един въпрос: *с какви коефициенти* да ги вземем? Това вече зависи само от физическите обстоятелства. Различни съвкупности от коефициенти отговарят на различни физични условия. Важното е да знаете едно нещо — „пространството", в което работите или с други думи, да знаете физическия смисъл на базисните състояния, които използувате. Така че първото нещо, което трябва да знаете, е какво представляват вашите базисни състояния. Тогава ще ви бъде ясно как да описвате явлението с езика на тези базисни състояния.

Бихме искали за момент да спрем и хвърлим поглед напред и да поговорим за това, какво би могло да се окаже бъдещото квантово-механично описание на природата — поне как изглежда то, според днешните ни представи. Първо, трябва да се спрем на избора на базисни състояния (понеже винаги има възможност за избор между различни представяния). Например за частица със спин 1/2 може да се използуват + или — състояния спрямо оста z. Но оста z няма никаква привилегия — можете да изберете каквато си щете ос. Но за еднообразие за частици със спин 1/2 винаги избираме оста z. Да започнем със случая на един електрон. Наред с двете възможности за спина (насочен нагоре или надолу по оста z) електронът притежава и импулс. Избираме съвкупността от базисни състояния по една за всяка стойност на импулса. А ако електронът няма определен импулс? Нищо страшно: казваме само какви са *базисните* състояния. Ако електронът няма определен импулс, все пак съществува известна амплитуда той да притежава даден импулс, друга амплитуда — за друг импулс и т. н. Ако спинът му не е насочен непременно нагоре, все пак съществува някаква вероятност за това и друга — за спин, насочен надолу. За пълното описание на електрона, *доколкото това сега ни е известно* се изисква само базисните състояния да се задават с *импулса и спина*. Значи една от приемливите съвкупности от базисни състояния $|i>$ за отделен електрон е да се окажат различните стойности на импулса, както и посоката, в която е насочен спинът — нагоре или надолу. Различните смеси от амплитуди, т. е. различните съчетания на числата C описват различни обстоятелства. Какво е поведението на един или друг електрон се определя от това, каква е амплитудата спинът му да бъде насочен нагоре, каква е тя — да бъде насочен надолу, като при това импулсът му да бъде равен на едно или друго число, и така за всички мислими стойности на импулса. Това е всичко, което трябва да се знае за пълното квантово-механично описание на един отделен електрон.

А как стоят нещата за система от няколко електрона? В този случай базисните състояния стават по-сложни. Нека електроните са два. Първо, имаме четири възможни състояния на спиновете: и двата електрона нагоре или първият нагоре, а вторият надолу или обратно — първият надолу, а вторият нагоре, и накрая — и двата насочени надолу. Освен това трябва да се посочи, че първият електрон има импулс $\mathbf{p}_1$, а вторият — $\mathbf{p}_2$. Базисните състояния за два електрона изискват посочването на два импулса и два знака за спина. За седем електрона ще са необходими седем двойки такива числа.

Ако имаме протон и електрон, ще бъде необходимо да се дадат както посоката на спина и импулса на протона, така и посоката на спина и импулса на електрона. Поне в някакво приближение това е така. *В действителност ние не знаем* какви са правилните представяния за нашия свят. Започваме с предположението, че ако знаем спина и импулса на електрона, а също и на протона, ще имаме необходимите базисни състояния. Много добре, но какво ще правим с „вътрешността" на протона? Да разсъждаваме така. Принудени сме да описваме водородния атом който се състои от един протон и един електрон, с базисни, състояния, задавайки посоките на спиновете на протона и електрона и всевъзможните им импулси. Освен това имаме различните комбинации от амплитудите C_i; всички те заедно описват поведението на атома на водорода при едни или други обстоя-

телства. Но представете си, че разглеждаме целия водороден атом като „частица“. Ако не знаехме, че той се състои от протон и електрон, бихме казали: „О, ние знаем какви са базисните му състояния — те отговарят на различните импулси на водородния атом“. Но в действителност това не е вярно, защото атомът на водорода е съставен от други частици. Следователно, той може да преминава в състояния с различни вътрешни енергии и затова точното описание на природата изисква познаването и на други подробности.

Същото е и с протона. Въпросът е: има ли протонът съставни части? Трябва ли да описваме протона, като задаваме всички мислими състояния на протоните, мезоните или странните частици? Това ние не знаем. Макар да допускаме, че електронът е проста частица и всичко, което можем да кажем за него, е да посочим неговия импулс и спин, съвсем не е изключена възможността утре в електрона да се открият някакви „зъбчати колелца“ и „ремъци“. А това ще означава, че нашите представи са непълни, неверни и неточни, така, както и представата за водорода, ако го описваме само с неговия импулс, защото се пренебрегва фактът, че водородният атом може да притежава вътрешни възбудени състояния. Ако и електронът може да притежава вътрешни възбуждания и да се превръща в нещо друго, например в мюон, то и него би следвало да описваме не просто със задаването на новата частица, а, вероятно с термините на по-сложни вътрешни структури. *Сега главният проблем в изучаването на фундаменталните частици* е в това — да се намерят какви са правилните представяния за описване на природата. Засега смятаме, че за електрона е достатъчно да се посочи неговият импулс и спин. Но допускаме също, че съществува идеализиран протон заедно със своите π-мезони, κ-мезони и т.н. и всички те трябва да се отчитат. Но да се вземат пред вид няколко десетки частици за описването само на една е безсмислено! Въпросът за това *какво* е фундаментална частица и *какво не е* — въпрос, който толкова много се обсъжда днес — това е въпросът какво ще бъде окончателното *представяне* в окончателното квантовомеханично описание на света. Ще бъде ли например импулсът на електрона все още в състояние да го описва? И въобще такава ли е правилната постановка на проблема? Подобни мисли възникват непрекъснато във всяко научно изследване. Във всеки случай проблемът е ясен: да се намерят правилните представяния! Но все още не знаем отговора. Ние даже не знаем „в това ли се състои“ проблемът или не; но ако проблемът е в това, отначало трябва да знаем „фундаментална“ ли е частицата или не.

В нерелативистичната квантова механика, където енергиите не са много високи и където не ни интересува вътрешния строеж на частиците, можем да правим най-сложни пресмятания, без да се грижим за тези подробности. Можем да работим само с импулсите и спиновете на частиците или ядрата и всичко ще бъде наред. В повечето химически реакции и други нискоенергетични процеси ядрата остават незасегнати, те не се възбуждат. Ако водородният атом се движи бавно и се сблъсква „спокойно“ с други водородни атоми, така че вътре в него нищо не се възбужда, не се излъчва и въобще с него не става нищо сложно, а всичко остава в основното състояние на енергията на вътрешното движение — в този случай можем да използуваме приближение, при което водородният атом може да се разглежда като отделна частица, без да се интересуваме от вътрешния му строеж. Това приближение е добро дотогава, докато кинетичната енергия на сблъскването е по-малка от 10 eV, т. е. по-малка от енергията на възбуждане на водородния атом до следващото му състояние. Често ще използуваме приближения, при които се изключват възможностите за вътрешни движения, намалявайки с това броя на подробностите, които трабва да се вземат пред вид при съставянето на базисната система. Разбира се, при това ние изпускаме някои явления, които се проявяват при по-високи енергии, но такива приближения силно опростяват анализа на

физичните проблеми. Например може да се разглежда сблъскването на два водородни атома при ниски енергии (или при всички химически процеси), без да се грижим за това, че атомите могат да се възбуждат. И така когато имаме право да пренебрегнем влиянието на различни вътрешни възбудени състояния на частицата, можем да изберем базисната съвкупност от състояния с определен импулс и z-компонента на момента на количество на движение.

Първата задача при описване на природата е намирането на подходящо представяне на базисните състояния. Но това е само началото. Трябва още да можем да казваме какво ще се „случи". Ако са известни „условията" в света в даден момент, искаме да знаем какви ще бъдат те в един по-късен момент. Затова трябва да се намерят законите, определящи изменението с времето. Сега се обръщаме към втората част от основите на квантовата механика, в която се разглежда как става изменението на състоянията с времето.

6-4. Как се изменят състоянията с времето

Вече разказахме как се описват процесите, когато пропускаме някакви частици през прибор. Но най-привлекателният, най-удобният „опит" е този, при който вие спирате и изчаквате известно време, т. е. приготовлявате състоянието φ и и преди да го анализирате, оставяте го в покой. Може да го оставите в някакво магнитно или електрично поле — това зависи от физическите обстоятелства. Във всеки случай, каквито и да са условията от момента t_1 до момента t_2 оставяте обекта без външна намеса. Да допуснем, че той е излязъл от прибора в момент t_1 в състояние φ. А след това той преминава през втори прибор, в който пребивава до момента t_2. По време на тази „задръжка" могат да се случат най-различни събития. След такава задръжка амплитудата за намиране на изследвания обект в състояние χ вече не ще бъде същата, каквато би била, ако тази задръжка не съществуваше. Понеже „очакването" е само частен случай на „прибора" това, което ще се случи, може да се опише чрез задаването на амплитудата в същия вид, както и в уравнение (6.17). Понеже операцията „очакване" е от особена важност, вместо с A ще я означаваме с U, а за да означим началния и краен момент t_1 и t_2, ще пишем $U(t_2,t_1)$. Интересуващата ни амплитуда ще бъде

$$<\chi \mid U(t_2,t_1) \mid \varphi>. \tag{6.27}$$

Като всяка друга амплитуда, тя може да бъде представена в една или друга базисна система:

$$\sum_{ij} <\chi \mid i><i \mid U(t_2,t_1) \mid j><j \mid \varphi>. \tag{6.28}$$

Тогава U ще се описва от пълната съвкупност базисни състояния

$$<i \mid U(t_2,t_1) \mid j>. \tag{6.29}$$

Впрочем трябва да отбележим, че матрицата $<i \mid U(t_2,t_1 \mid j>$ би могла да даде повече подробности, отколкото е необходимо. Теоретик от висока класа, работещ в областа на физиката на високите енергии, може да се занимава например с такъв проблем (защото обикновено такива са експериментите, които се поставят); процесът започва с две частици, да кажем протон и протон, налитащи един върху друг от безкрайност. (В действителност в лабораторията едната частица е в покой, а другата излита от ускорителя, който в атомни мащаби се намира в безкрайност.) Частиците се сблъскват и в резултат се появяват, да кажем, два K-мезона, шест π-мезона и два неутрона с определени импулси и посоки на движение. Каква е амплитудата за такова събитие? Математически това се описва по следния начин. Състоянието φ дава спиновете на налитащите частици, а χ — сведе-

нията, които имаме за крайното състояние на събитието. В нашия пример с каква амплитуда вие ще получите шест мезона с определени импулси и спинове, два неутрона с техните импулси и спинове и т. н. С други думи, χ се отбелязва чрез импулсите и спиновете на всички частици от крайното състояние. И работата на теоретика е да изчисли амплитудата (6.27). В действителност обаче теоретикът го интересува само частния случай, когато $t_1 = -\infty$ и $t_2 = +\infty$. (Ние не получаваме експериментални данни за подробния ход на процеса, а само за постъпващите и излитащи частици.) Граничният случай за $U(t_2, t_1)$, когато $t_2 \to +\infty$, а $t_1 \to -\infty$, се означава със S; на теоретика е необходима величината

$$<\chi | S | \varphi>.$$

Или ако използуваме формата (6.28), той трябва да изчисли матрицата

$$<i | S | j>,$$

наречена *S-матрица*. Така че, ако видите физик-теоретик, който мери с крачки стаята и си мърмори: „Аз трябва да изчисля S-матрицата", вече ще знаете над какво си блъска главата.

Как да се анализира S-матрицата, т. е. как да се намерят законите, на които тя се подчинява, това е интересен въпрос. В релативистичната квантова механика на високите енергии това се прави по един начин, в нерелативистичната квантова механика — по друг, по-удобен начин. (Той е пригоден и за релативистичния случай, но там не е така удобен.) Идеята е да се изведе U-матрицата за неголеми интервали от време, т. е. за близки моменти t_2 и t_1. Ако можете да намерите последователност от такива U за последователни интервали от време, ще можете да проследите как всичко се изменя с времето. Веднага е ясно, че за релативистичния случай този способ не е съвсем подходящ, защото според теорията на относителността не е много просто да се каже как „едновременно" ще изглеждат нещата навсякъде. Но ние няма да се занимаваме с тази задача, защото си имаме достатъчно грижи и само с нерелативистичната квантова механика.

Да разгледаме матрицата U за интервала време от t_1 до t_3, където t_3 е по-голямо от t_2. С други думи, да вземем три последователни момента: t_1 по-малко от t_2, t_2 по-малко от t_3. Твърдим, че матрицата, която обхваща периода от t_1 до t_3, се получава чрез последователно *умножаване* на всичко, което се извършва от t_1 до t_2 и след това от t_2 до t_3. Това е еквивалентно на действието на два последователно поставени прибора. Тогава, използувайки приетите в гл. 3, § 6 означения, можем да напишем

$$U(t_3, t_1) = U(t_3, t_2) U(t_2, t_1) . \qquad (6.30)$$

С други думи, ако умеем да анализираме последователността от междинните краткотрайни интервали, можем да анализираме и всеки временен интервал. Просто умножаваме всички отделни части. Това представлява и методът на нерелативистичната квантова механика.

И така задачата е да се намери матрицата $U(t_2, t_1)$ за безкрайно малък интервал от време $t_2 = t_1 + \Delta t$. Да се запитаме: ако в момент t имаме състояние φ, как ще изглежда то след безкрайно малък интервал от време Δt? Сега да видим как можем да запишем това. Нека означим състоянието в момент t с $|\psi(t)>$ (посочваме зависимостта на ψ от времето, за да бъде напълно ясно, че става дума за условията в момент t). Сега да си поставим въпроса: какво ще бъде положението след краткия интервал от време Δt? Отговорът е:

$$|\psi(t+\Delta t)> = U(t+\Delta t, t) |\psi(t)>. \qquad (6.31)$$

Има се предвид същото, което и в (6.25), а именно, че амплитудата да се намери χ в момент $t+\Delta t$ е

$$<\chi | \psi(t+\Delta t)> = <\chi | U(t+\Delta t, t) | \psi(t)>. \qquad (6.32)$$

Понеже все още не сме достатъчно интимни с тези абстракции нека проектираме амплитудите в определено представяне. Умножаваме двете страни на (6.31) с $<i|$ и получаваме

$$<i|\psi(t+\Delta t)>=<i|U(t+\Delta t,t)|\psi(t)>. \tag{6.33}$$

Същевременно можем да разложим и $|\psi(t)>$ по базисните състояния и да напишем

$$<i|\psi(t+\Delta t)>=\sum<i|U(t+\Delta t)|j><j|\psi(t)>. \tag{6.34}$$

Това може да се интерпретира по следния начин. Ако с $C_i(t)=<i|\psi(t)>$ означим амплитудата за пребиваване в базисно състояние i в момент t, можем да считаме, че тази амплитуда (помнете, че това е само едно число) се мени с времето. Всяко C_i става функция на времето t. Освен това, знаем *как* се мени амплитудата с времето. Всяка амплитуда в момента $(t+\Delta t)$ е пропорционална на *всички други* амплитуди в момент t, умножена на ред коефициенти. Да означим U-матрицата с U_{ij}, считайки

$$U_{ij}=<i|U|j>.$$

Тогава можем да запишем (6.34) така:

$$C_i(t+\Delta t)=\sum_j U_{ij}(t+\Delta t)\,C_j(t). \tag{6.35}$$

Ето как изглежда динамиката на квантовата механика.

Засега обаче ние знаем малко за U_{ij}. Знаем само, че при Δt, клонящо към нула, не трябва да се изменя нищо, трябва да се получи просто пак началното състояние. Следователно трябва да имаме $U_{ii}\to 1$ и $U_{ij}\to 0$ при $i\neq j$. С други думи, $U_{ij}\to\delta_{ij}$ при $\Delta t\to 0$. Освен това, имаме право да предположим, че при малки Δt всяко U_{ij} ще се отличава от δ_{ij} с величина, пропорционална на Δt; така че можем да запишем

$$U_{ij}=\delta_{ij}+K_{ij}\,\Delta t. \tag{6.36}$$

По исторически и по други причини обикновено от коефициента k_{ij} изнасят множителя $\left(\frac{-i}{\hbar}\right)$[1] и предпочитат да записват

$$U_{ij}(t+\Delta t,\,t)=\delta_{ij}-\frac{i}{\hbar}H_{ij}(t)\,\Delta t. \tag{6.37}$$

Разбира се, това е еквивалентно на (6.36). Ако искате, това е просто определение за коефициента H_{ij}. Членовете H_{ij} са производните по t_2 на коефициентите $U_{ij}(t_2,\,t_1)$, пресметнати при $t_2=t_1=t$.

Като поставим в (6.35) този израз за U, получаваме

$$C_i(t+\Delta t)=\sum_j\left[\delta_{ij}-\frac{i}{\hbar}H_{ij}(t)\,\Delta t\right]C_j(t). \tag{6.38}$$

Ако сумираме членовете с δ_{ij}, получаваме $C_i(t)$, което можем да пренесем от другата страна на уравнението. Делим на Δt и това дава

$$\frac{C_i(t+\Delta t)-C_i(t)}{\Delta t}=-\frac{i}{\hbar}\sum H_{ij}(t)\,C_j(t)$$

или

$$i\hbar\frac{dC_i(t)}{dt}=\sum H_{ij}(t)\,C_j(t). \tag{6.39}$$

Вие помните, че $C_i(t)$ е амплитудата $<i|\psi>$ за намиране на състоянието ψ в едно от базисните състояния i (в момент t).

[1] Тук се получава малка неприятност с означенията. В този множител i означава имагинерната единица $\sqrt{-1}$, а не базисния индекс за i-тото състояние. Да се надяваме, че това няма много да ви смути.

Следователно уравнение (6.39) ни показва как се мени с времето всеки от коефициентите $<i \mid \psi>$. Но това е все едно да казваме, че (6.39) показва как се мени с времето състоянието ψ, понеже чрез амплитудите $<i \mid \psi>$ ние описваме именно ψ. Изменението на ψ с времето се описва чрез матрицата H_{ij}. Разбира се, тя трябва да включва всичко, което сме правили със системата, за да предизвикаме това изменение. Ако знаем матрицата H_{ij}, която съдържа в себе си цялата физика на явленията и може, изобщо казано, да зависи от времето, ще имаме пълно описание на поведението на системата с времето. По такъв начин (6.39) представлява квантово-механичният закон за динамиката на света.

(Необходимо е да посочим, че ние винаги ще избираме съвкупност от базисни състояния, които са фиксирани и не се изменят с времето. Понякога се използуват такива базисни състояния, които сами се менят. Това е равносилно обаче на използуването на въртяща се координатна система в класическата механика, а ние не искаме да навлизаме в такива подробности.)

6-5. Хамилтонова матрица

Идеята за квантово-механичното описание на света се състои в избирането на съвкупността от базисни състояния i и написването на физическите закони, като се задава матрицата от коефициенти H_{ij}. Тогава ще имаме всичко, което ни е необходимо — можем да отговаряме на всеки въпрос за това, какво ще се случи. Остава ни да научим правилата, по които се намира H, отговарящо на дадената физическа обстановка: какво H отговаря за магнитно поле, какво — за електрично и т. н. Всъщност това е най-трудната част на задачата. Например за новите странни частици ние съвсем не знаем какви H_{ij} да употребяваме. С други думи, никой не знае *пълното* H_{ij} за целия свят. (Трудността частично се състои в това, че едва ли можем да се надяваме да открием пълното H_{ij}, щом не са ни известни самите базисни състояния!) Ние наистина знаем превъзходни приближения за нерелативистични явления и някои други специални случаи. В частност знаем вида на H_{ij}, необходим за описване на движението на електроните в атома — всичко, необходимо за химията. Но ние не знаем пълното, истинското H за цялата Вселена.

Коефициентите H_{ij} наричат *хамилтонова матрица* или пократко *хамилтониан*. (Как е станало така, че Хамилтон, който е работил през 30-те години на миналия век, е дал името си на квантово-механичната матрица, е дълга история.) Много по-добре би било тя да се наричаше *енергетична матрица*, поради причини, които ще ви станат ясни, когато поработим с нея. *Как да се намери хамилтонианът — това е въпросът!*

Хамилтонианът има едно свойство, което се написва веднага

$$H_{ij}^{*} = H_{ji}. \tag{6.40}$$

Това следва от запазването на пълната вероятност за пребиваване на системата *поне в някое състояние*. Ако в началото имахме частица (или какъв да е обект, ако искате — целия свят), то е невъзможно тя да изчезне с течение на времето. Пълната вероятност да я намерим *някъде* е равна на

$$\sum_i | C_i (t) |^2,$$

и не трябва да се изменя с времето. Ако това е в сила за което и да е начално състояние φ, уравнение (6.40) също трябва да е изпълнено.

Нека като първи пример да вземем случай, когато физическите условия не се менят с времето; имаме пред вид *външните*

физически условия, така че H не зависи от времето и никой не включва или изключва магнити. Нека също да изберем система, за описването на която е достатъчно едно базисно състояние; такова приближение е подходящо за водороден атом в покой или нещо подобно. Тогава уравнение (6.39) твърди, че

$$i\hbar \frac{\partial C_1}{\partial t} = H_{11}C_1. \tag{6.41}$$

Само едно уравнение — това е всичко! Ако H_{11} е постоянно, това диференциално уравнение се решава лесно и получаваме

$$C_1 = (\text{const})\, e^{-(i/\hbar)H_{11}t}. \tag{6.42}$$

По този начин състоянието с определена енергия $E = H_{11}$ зависи от времето. Вие виждате защо H_{ij} е била наречена енергетична матрица: тя обобщава понятието енергия за по-сложни системи.

Сега за да разберем още по-добре смисъла на това уравнение, нека разгледаме система с две базисни състояния. Тогава (6.39) се записва така

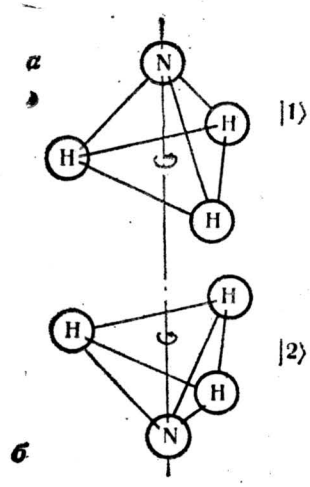
$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = H_{11}C_1 + H_{12}C_2; \quad i\hbar \frac{dC_2}{dt} = H_{21}C_1 + H_{22}C_2. \tag{6.43}$$

Ако тук всички H са независими от времето, тези уравнения се решават лесно. Това можете да направите сами, а ние ще се върнем към тях малко по-късно. Ето че вече можете да правите квантово-механични пресмятания, стига само H да не зависи от времето!

6-6. Молекула на амоняка

Сега искаме да покажем как могат да бъдат използувани динамичните уравнения на квантовата механика за описването на някакво физическо събитие. Избрали сме интересен и прост пример, при който въз основа на някои разумни предположения за хамилтониана можем да изведем важни (даже с практическа стойност) резултати. Да вземем случай, когато са достатъчни две състояния — такава е молекулата на амоняка.

Молекулата на амоняка е образувана от един атом азот и три атома водород. Трите водородни атома лежат в равнина, която не минава през атома на азота, така че молекулата има форма на пирамида (фиг. 6.1, *а*). Тази молекула, както и всяка друга има безкрайно много състояния. Тя може да се върти около която и да е ос, да се движи във всяка посока, да вибрира и т. н. Следователно това съвсем не е система с две състояния. Но ние ще направим следното приближение: ще предположим, че всички степени на свобода са фиксирани и не са свързани с тези, които ни интересуват сега. Ще считаме, че молекулата може само да се върти около оста на симетрия (както това е показано на фигурата), а импулсът на постъпателното движение на молекулата е равен на нула. Това фиксира всички условия, освен едно: *все още съществуват две възможни положения за атома на азота* — той може да се окаже от едната страна на равнината на водородните атоми, а може да бъде и от другата страна (фиг. 6.1). Така че ще разглеждаме и молекулата като система с две състояния. Под това ще разбираме, че съществуват само две състояния, за които трябва да се грижим, докато другите са фиксирани. Както виждате, ако даже е известно, че молекулата се върти около ос с определен момент на количество на движение и вибрира по определен начин, все едно — остават две допустими състояния. Ще казваме, че молекулата се намира в състояние $|1\rangle$, когато азотът е „отгоре“ (фиг. 6.1, *а*) и в състояние $|2\rangle$, когато азотът е „отдолу“ (фиг. 6.1, *б*). В нашия анализ за поведението на молекулата на амоняка ще приемем състоянията $|1\rangle$ и $|2\rangle$ като съвкупност от базисни състояния. Истинското състояние $|\psi\rangle$ на молекулата във всеки



Фиг. 6.1. Две равностойни геометрични положения на молекулата на амоняка

момент може да бъде представено чрез задаване на $C_1=\langle 1|\psi\rangle$ — амплитудата за пребиваване в състояние $|1\rangle$ и $C_2=\langle 2|\psi\rangle$ — амплитудата за пребиваване в състояние $|2\rangle$. Тогава като използуваме (6.8), векторът на състоянието $|\psi\rangle$ може да се запише във вида

$$|\psi\rangle=|1\rangle\langle 1|\psi\rangle+|2\rangle\langle 2|\psi\rangle,$$

или

$$|\psi\rangle=|1\rangle C_1+|2\rangle C_2. \tag{6.44}$$

Тук е интересно следното: ако е известно, че в определен момент молекулата е била в дадено състояние, в следващия момент тя не може *вече да бъде* в същото състояние. Двата коефициента C се изменят с времето според уравнение (6.43), което е вярно за всяка система с две състояния. Да предположим, че сме направили някакво наблюдение (или по някакъв начин сме избрали молекулата) и *знаем*, че *първоначално* молекулата се намира в състояние $|1\rangle$. След време се появява вероятност за нейното засичане в състояние $|2\rangle$. За да се установи колко голяма е тази вероятност, е необходимо да се реши диференциалното уравнение, което показва как се менят амплитудите с времето.

Единствената трудност е, че ние не знаем матрицата H_{ij} в (6.43). Но все пак можем да кажем нещо. Нека приемем, че щом молекулата е в състояние $|1\rangle$, за нея няма никаква възможност да попадне в състояние $|2\rangle$ и обратно. Тогава H_{12} и H_{21} ще бъдат нули и (6.43) ще има вида

$$i\hbar\frac{dC_1}{dt}=H_{11}C_1;\quad i\hbar\frac{dC_2}{dt}=H_{22}C_2.$$

Тези уравнения се решават лесно и се получава:

$$C_1=(\text{const})\,e^{-(i/\hbar)H_{11}t},\qquad C_2=(\text{const})\,e^{-(i/\hbar)H_{22}t}. \tag{6.45}$$

Те представляват просто амплитудите на *стационарните* състояния с енергии $E_1=H_{11}$ и $E_2=H_{22}$. Освен това знаем, че за молекулата на амоняка състоянията $|1\rangle$ и $|2\rangle$ притежават определена симетрия. Ако природата има достатъчно разумно поведение, трябва матричните елементи H_{11} и H_{22} да са равни помежду си. Ще ги означим с E_0, защото те отговарят на енергията, която биха притежавали състоянията, ако H_{12} и H_{21} бяха равни на нула.

Но (6.45) не отразява това, което в действителност става с амоняка. Оказва се, че амонякът има възможност да прехвърля своя азотен атом през трите водородни атома от едната на другата страна. Това е много трудно: за да премине половината път, на азота му е необходима енергия. А ако няма достатъчно енергия, как може да премине от другата страна? Просто съществува *някаква* амплитуда за това той да *проникне* през енергетичния бариер. В квантовата механика е разрешено транзитното преминаване през такива енергетично нелегални области. Оказва се, че съществува неголяма амплитуда за това, че молекулата, като тръгне от състояние $|1\rangle$ ще премине в състояние $|2\rangle$. В действителност коефициентите H_{12} и H_{21} не са равни на нула. И пак поради симетрията е ясно, че те трябва да са равни поне по големина. И наистина ние вече знаем, че изобщо H_{ij} се равнява на комплексно спрегнатата стойност на H_{ji}, т. е. те могат да се различават само по фаза. Както ще видите по-нататък, оказва се, че тези коефициенти могат да се положат равни помежду си без с това да се губи общност. По-късно ще ни бъде удобно да ги считаме равни на отрицателно число; ще приемем, че $H_{12}=H_{21}=-A$. Тогава се получава следната двойка уравнения

$$i\hbar\frac{dC_1}{dt}=E_0C_1-AC_2, \tag{6.46}$$

$$i\hbar\frac{dC_2}{dt}=E_0C_2-AC_1. \tag{6.47}$$

Тези уравнения са доста прости и можем да ги решаваме по различни начини. Удобно е да се решават така. Събираме ги и получаваме

$$i\hbar \frac{d}{dt}(C_1+C_2)=(E_0-A)(C_1+C_2),$$

решението на което е

$$C_1+C_2=ae^{-(i/\hbar)(E_0-A)t}. \tag{6.48}$$

А разликата между (6.47) и (6.46) ще даде

$$i\hbar \frac{d}{dt}(C_1-C_2)=(E_0+A)(C_1-C_2),$$

което има решение

$$C_1-C_2=be^{-(i/\hbar)(E_0+A)t}. \tag{6.49}$$

Двете константи от интегрирането означихме с a и b; те трябва да се изберат така, че да се получават подходящи начални условия за дадената физическа задача. И накрая от сумата и от разликата на (6.48) и (6.49) получаваме C_1 и C_2

$$C_1(t)=\frac{a}{2}e^{-(i/\hbar)(E_0-A)t}+\frac{b}{2}e^{-(i/\hbar)(E_0+A)t}, \tag{6.50}$$

$$C_2(t)=\frac{a}{2}e^{-(i/\hbar)(E_0-A)t}-\frac{b}{2}e^{-(i/\hbar)(E_0+A)t}. \tag{6.51}$$

Те се различават само по знака пред второто събираемо.

Ние получихме решенията, но какво означават те? (В квантовата механика трудността е не само в намирането на решенията, но и в осмислянето им.) Забележете, че при $b=0$ и двете решения притежават честоти $\omega=(E_0-A)/\hbar$. Ако всичко се мени с еднаква честота, това означава, че системата се намира в състояние с определена енергия, в дадения случай — с енергия (E_0-A). Следователно съществуват стационерни състояния с такава енергия; при нея двете амплитуди C_1 и C_2 са равни една на друга. Така достигаме до извода, че *молекулата на амоняка притежава определена енергия* (E_0-A), ако за атома на азота амплитудите да се окаже, „отдолу“ или „отгоре“ са еднакви.

Съществува и друго допустимо стационарно състояние: когато $a=0$ и двете амплитуди имат еднаква честота $\frac{(E_0+A)}{\hbar}$. Значи, съществува и друго състояние с определена енергия (E_0+A), когато двете амплитуди са равни, но се различават по знак: $C_2=-C_1$. Това са и всичките състояния с определена енергия. В следващата глава ще поговорим по-подробно за състоянията на молекулата на амоняка; тук ще отбележим само някои особености.

Ние достигнахме до заключението, че *поради* съществуването на някаква вероятност за преминаване на азотния атом от едно положение в друго, енергията на молекулата на амоняка **не** е равна просто на E_0, както можеше да се очаква, а притежава *две* енергетични нива: (E_0+A) и (E_0-A). Всяко от възможните състояния на молекулата, независимо от енергията му, се „разцепва“ на две нива. Казваме „*всяко* състояние“, защото, както помните, избрахме едно определено състояние на въртене, с определена вътрешна енергия и т. н. И за всяко от подобните мислими условия възникват двойки енергетични нива.

Сега да поставим следния въпрос. Нека *ни е известно*, че при $t=0$ молекулата се намира в състояние $|1>$, т. е. че $C_1(0)=1$ и $C_2(0)=0$. Каква е вероятността молекулата в момент t да бъде намерена в състояние $|2>$ или пък тя да се окаже в този момент все още в състояние $|1>$? Нашите начални условия показват какви трябва да бъдат a и b в (6.50) и (6.51). Като положим $t=0$, ще имаме

$$C_1(0)=\frac{a+b}{2}=1, \quad C_2(0)=\frac{a-b}{2}=0.$$

Следователно, $a=b=1$. Заместваики ги във формулите за $C_1(t)$ и $C_2(t)$, получаваме

$$C_1(t)=e^{-(i/\hbar)E_0 t}\left(\frac{e^{(i/\hbar)At}+e^{-(i/\hbar)At}}{2}\right),$$

$$C_2(t)=e^{-(i/\hbar)E_0 t}\left(\frac{e^{(i/\hbar)At}-e^{-(i/\hbar)At}}{2}\right),$$

което можем да запишем и така

$$C_1(t)=e^{-(i/\hbar)E_0 t}\cdot\cos\frac{At}{\hbar}, \tag{6.52}$$

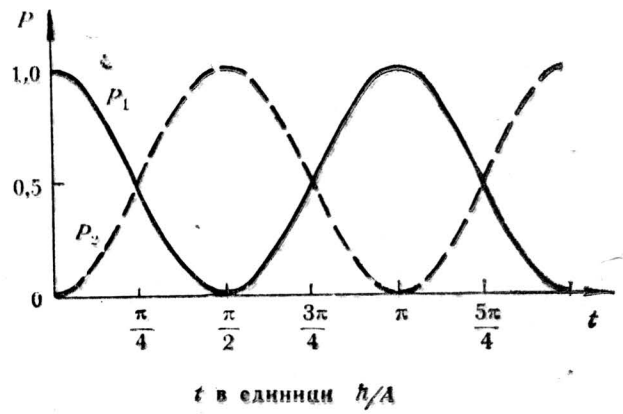
$$C_2(t)=ie^{-(i/\hbar)E_0 t}\cdot\sin\frac{At}{\hbar}. \tag{6.53}$$

Стойностите на двете амплитуди се изменят хармонично с времето.

Вероятността молекулата да бъде открита в състояние $|2\rangle$ в момент t е равна на квадрата на модула на $C_2(t)$:

$$|C_2(t)|^2=\sin^2\frac{At}{\hbar}. \tag{6.54}$$

Както трябва и да се очаква, тя започва от нула, расте до единица и след това се колебае между тези две стойности, както това е показано с кривата P_2 на фиг. 6.2. Вероятността за пребиваване в състояние $|1\rangle$ също не остава постоянна. Тя се „прелива“ във второто състояние, докато вероятността да намерим молекулата в първото състояние стане нула, както се вижда от кривата P_1 на същата фигура.



Фиг. 6.2. P_1 — вероятността за това, молекулата на амоняка, намираща се в състояние $|1\rangle$ при $t=0$, да се окаже в момент t в същото състояние $|1\rangle$; P_2 — вероятността за това, тя да бъде забелязана в състояние $|2\rangle$.

По-рано разглеждахме какво става при люлеенето на две еднакви махала, свързани помежду си (вж. гл. 49, т. I). Когато залюлеем едното от тях, постепенно започва да се люлее и другото, докато в него се съсредоточи цялата енергия. След това процесът се обръща и енергията се връща в първото махало. Аналогично е и положението с молекулата на амоняка. Скоростта, с която става обмяната на енергията зависи от връзката между двете махала. Освен това, както помните, при тях съществуват два определени типа движение (всяко с определена честота), които нарекохме основни типове колебания. Ако и двете махала се отклонят заедно, те ще се колебаят с еднаква честота. Ако пък едното се отклони в една посока, а другото — в друга, се появяват стационарни колебания от друг тип, също с определена честота.

Подобно е положението и сега — молекулата на амоняка математически прилича на двойка махала. Съществуват *две* честоти

$\frac{(E_0+A)}{\hbar}$ и $\frac{(E_0-A)}{\hbar}$, при които махалата се колебаят заедно или едно срещу друго.

Сходството с махалата не е много по-дълбоко отколкото принципа, че еднакви уравнения имат и еднакви решения. Линейните уравнения за амплитудите (6.39) много приличат на линейните уравнения за хармоничните осцилатори. (В действителност, именно на тази прилика се дължи успеха на класическата теория за показателя на пречупване, в който квантово-механичния атом заменяме с хармоничен осцилатор, макар класически да е неразумно да се говори за електрон, обикалящ около ядрото.) Отмествайки атома на азота на една страна, вие ще получавате *суперпозиция* на тези две колебания и по този начин своеобразно биене, защото системата *не ще се* намира в едно или друго състояние с определена честота. Обаче разцепването на енергетичните нива на амонячната молекула представлява строго квантово-механичен ефект.

Разцепването на енергетичните нива на молекулата на амоняка има важно практическо приложение, което ще опишем в следващата глава. Най-накрая ще имаме пример на реална физическа задача, която ще можем да разберем с помощта на квантовата механика!

7

Амонячен мазер

7-1. Състояния на амонячната молекула

7-2. Молекулата на амоняка в статично електрично поле

7-3. Преходи в поле, зависещо от времето

7-4. Резонансни преходи

7-5. Нерезонансни преходи

7-6. Поглъщане на светлина

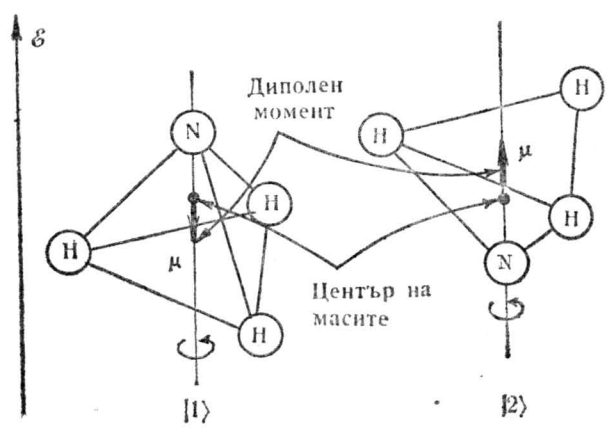
7-1. Състояния на амонячната молекула

В тази глава ще разгледаме приложението на квантовата механика в един прибор, а именно — амонячния мазер. Може би ще се учудите защо изоставяме по средата изложението на формалния апарат на квантовата механика и се обръщаме към разглеждането на частна задача. По-късно ще видите, че много от характерните черти на тази задача се срещат и в общата теория на квантовата механика, така че подробното й изучаване ще ни даде много неща. Амонячният мазер е устройство за генериране на електромагнитни вълни. Неговото действие се основава на амонячната молекула, за които накратко бе разказано в предишната глава. Затова нека отначало напомним това, което вече ни е известно.

Молекулата на амоняка има много на брой състояния. Но ще считаме, че тя е система с две състояния (с две нива) и ще ни интересува само това, което става с молекулата, когато тя се намира в някакво зададено състояние на въртене или постъпателно движение. Физически модел на тези две състояния можем да си представим нагледно по следния начин. Ако въртим амонячната молекула около ос, минаваща през атома на азота и перпендикулярна на равнината на водородните атоми, както това е показано на фиг. 7.1, ще забележим, че съществуват два вида състояния, които не преминават едно в друго при тези въртения и се различават по положението на азотния атом. Азотът може да се намира или от едната страна на равнината на водородните атоми, или от другата. Тези две състояния ще означим с $|1\rangle$ и $|2\rangle$ и при провеждане на анализа за поведението на амонячната молекула ще ги изберем за базисни състояния.

В такава система с две базисни състояния всяко състояние на системата $|\psi\rangle$ може да бъде описано като линейна комбинация на двете базисни състояния; това означава, че съществува определена амплитуда C_1 за пребиваване в едното базисно състояние и друга — C_2 за пребиваване във второто базисно състояние. Векторът на състоянието $|\psi\rangle$ може да се запише във вида

$$|\psi\rangle = |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2, \tag{7.1}$$



Фиг. 7.1. Физически модел на двете базисни състояния на амонячната молекула
Електричните диполни моменти на тези състояния са равни на μ

където

$$C_1 = \langle 1 | \psi \rangle \quad \text{и} \quad C_2 = \langle 2 | \psi \rangle .$$

Изменението с времето на тази двойка амплитуди се дава от хамилтоновото уравнение (6.43). Като използуваме симетрията на двете състояния на молекулата, можем да положим $H_{11} = H_{22} = E_0$ и $H_{12} = H_{21} = -A$; тогава решението на хамилтониана ще бъде [вж. (6.50) и (6.51)]

$$C_1 = \frac{a}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t} + \frac{b}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}, \tag{7.2}$$

$$C_2 = \frac{a}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t} - \frac{b}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}. \tag{7.3}$$

Да разгледаме сега тези решения по-внимателно. Нека отначало молекулата да е била в състояние $|\psi_{II}\rangle$, поради което коефициентът $b = 0$. Тогава при $t = 0$ амплитудите за пребиваване в състоянията $|1\rangle$ и $|2\rangle$ са еднакви и *остават същите през цялото време*. Техните фази се изменят с времето еднакво с честота $(E_0 - A)/\hbar$. И по същия начин, ако бяхме поставили молекулата в състояние $|\psi_I\rangle$: тогава $a = 0$ и амплитудата C_2 ще бъде равна на C_1 със знак минус и това би се запазило постоянно; сега двете амплитуди биха се меняли с времето с честота $(E_0 + A)\hbar$. Това са всички възможни състояния, при които C_1 и C_2 не зависят от времето — други възможности не съществуват.

Намерихме две частни решения, при които амплитудите *не се изменят с времето* и освен това фазите се изменят с еднаква честота. Това са *стационарните състояния*, т. е. *състояния с определена енергия*. Състоянието $|\psi_{II}\rangle$ притежава енергия $E_{II} = E_0 - A$, а състоянието $|\psi_I\rangle$ — енергия $E_I = E_0 + A$. Други стационарни състояния освен тези не съществуват, т. е. установяваме, че молекулата на амоняка има две енергетични нива, разделени на разстояние $2A$. (Става дума за двете енергетични нива за даденото състояние на въртения и колебания, от които тръгваме.[1])

Ако атомът на азота не можеше да прескача от „горе" — „долу" и обратно, трябваше да приемем A равно на нула и двете енергетични нива (с енергия E_0) биха се слели в едно. В действителност нивата са разделени на $\pm A$ от средната стойност E_0, т. е. разстоянието между тях е $2A$. Но понеже A е малко, то и разликата в енергиите при това разцепване е много малка.

За да се възбуди *електрон* от атома, необходими са доста високи енергии, необходими са фотони от оптичния или ултравиолетовия диапазон, докато за да се възбудят колебания на молекулата са необходими инфрачервени фотони. Ако става дума за възбуждане на *въртения*, разликата в енергиите на състоянията съответствуват на фотони от далечната инфрачервена област. Но разликата в енергиите е по-малка от всички тях, тя е в областта на микровълновия диапазон. Опитно е било определено, че в амонячната молекула наистина съществуват две енергетични нива, разделени на 10^{-4} eV, което отговаря на честота 24 000 MHz, т. е. $2A = \hbar f$, където $f = 24\,000$ MHz (дължината на вълната е $1\frac{1}{4}$ cm.) Следователно имаме работа с молекула, чиито преходи водят до излъчване на микровълни, а не светлина от видимата част на спектъра.

За по-нататъшните ни пресмятания ще бъде необходимо по-удобно записване на тези две състояния с определени енергии. Да си представим, че сме съставили амплитудата C_{II} от сумата на двете числа C_1 и C_2:

$$C_{II} = C_1 + C_2 = \langle 1 | \Phi \rangle + \langle 2 | \Phi \rangle . \tag{7.4}$$

[1] Ще бъде полезно по-нататък (и при четене, и при произнасяне на глас) да се различават арабските 1 и 2 от римските I и II.

Какво ли пък означава това? Много просто: това е амплитудата състоянието $|\psi>$ да се окаже в новото състояние $|II>$, в което амплитудите на първоначалните базисни състояния са равни помежду си. Казано с други думи, когато пишем $C_{II}=<II|\psi>$, ние сме в правото си да се абстрахираме от $|\psi>$ в уравнението (7.4), понеже то е изпълнено при всички Φ и да пишем

$$<II|=<1|+<2|,$$

което означава същото както и

$$|II>=|1>+|2>. \tag{7.5}$$

Амплитудата за това състояние $|II>$ да се окаже в състояние $|1>$ е $<1|II>=<1|1>+<1|2>$,
а това, разбира се, е равно на единица, понеже $|1>$ и $|2>$ са базисни състояния. Амплитудата за намиране на състоянието $|II>$ в състояние $|2>$ също е равна на единица, така че за състоянието $|II>$ амплитудата тя да се окаже в базисните състояния $|1>$ и $|2>$ е еднаква.

Но тук възниква нова трудност. За състоянието $|II>$ пълната вероятност да се окаже в *едното или другото* базисно състояние се получава по-голяма от единица. Но това означава само, че векторът на състоянието е „нормиран" несполучливо. За да оправим работата, трябва за всяко състояние да имаме $<II|II>=1$. Използувайки общата връзка

$$<\chi|\Phi>=\sum_i <\chi|i><i|\Phi>,$$

като предположим, че Φ и χ са състоянията II и сумираме по базисните състояния $|1>$ и $|2>$, получаваме

$$<II|II>=<II|1><1|II>+<II|2><2|II>.$$

Както се и полага, това ще дава единица, ако изменим нашето определение за C_{II} [вж. уравнение (7.4)] и приемем

$$C_{II}=\frac{1}{\sqrt{2}}[C_1+C_2].$$

По такъв начин можем да построим амплитудата

$$C_1=\frac{1}{\sqrt{2}}[C_1-C_2]$$

или

$$C_2=\frac{1}{\sqrt{2}}[<1|\Phi>-<2|\Phi>]. \tag{7.6}$$

Тази амплитуда е проекция на състоянието $|\Phi>$ върху новото състояние $|I>$, което притежава амплитуди с противоположни знаци за пребиваване в състоянията $|1>$ и $|2>$. По-точно, (7.6) означава същото, което и

$$<I|=\frac{1}{\sqrt{2}}[<1|-<2|] \text{ или } |I>=\frac{1}{\sqrt{2}}[|1>-|2>], \tag{7.7}$$

откъдето следва, че

$$<1|I>=-<2|I>=\frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Защо е необходимо всичко това? С каква цел се прави? Работата е в това, че състоянията $|I>$ и $|II>$ *могат да бъдат приети за нова съвкупност от базисни състояния*, особено подходящи за описването на стационарните състояния на молекулата на амоняка. Вие помните, че за базисните състояния е в сила условието

$$<i|j>=\delta_{ij}.$$

Но вече положихме

$$<I|I>=<II|II>=1.$$

А от (7.5) и (7.7) лесно се вижда, че

$$<I|II>=<II|I>=0.$$

Амплитудите $C_1=\langle I|\Phi\rangle$ и $C_2=\langle II|\Phi\rangle$ за това, състоянието $|\Phi\rangle$ да се окаже в едно от нашите нови базисни състояния $|I\rangle$ и $|II\rangle$ трябва също да удовлетворяват хамилтоново уравнение от вида (6.39). И наистина, ако определим разликата между уравненията (7.2) и (7.3) и диференцираме по t, ще получим

$$i\hbar\frac{dC_I}{dt}=(E_0+A)C_I=E_I C_I. \tag{7.8}$$

А от сумата на (7.2) и (7.3) получаваме

$$i\hbar\frac{dC_{II}}{dt}=(E_0-A)C_{II}=E_{II}C_{II}. \tag{7.9}$$

Ако за базисни състояния се вземат $|I\rangle$ и $|II\rangle$, хамилтоновата матрица е много проста и е съставена от:

$$H_{I,I}=E_I, \qquad H_{I,II}=0,$$
$$H_{II,I}=0, \qquad H_{II,II}=E_{II}.$$

Обърнете внимание, че всяко от уравненията (7.8) и (7.9) приличат много на получените гл. 6, § 6 уравнения за системи с едно състояние. Те дават експоненциална зависимост от времето, която съответствува на определена енергия. С нарастване на времето амплитудите за пребиваване във всяко от състоянията стават независими помежду си.

Определените по-рано стационарни състояния $|\psi_I\rangle$ и $|\psi_{II}\rangle$, разбира се, представляват също и решения на уравнения (7.8) и (7.9). За състояние $|\psi_I\rangle$ (за което $C_1=C_2$) ще имаме

$$C_I=e^{-(i/\hbar)(E_0+A)t}, \quad C_{II}=0 \tag{7.10}$$

За състояние $|\psi_{II}\rangle$ (за което $C_1=C_2$) ще имаме

$$C_I=0, \qquad C_{II}=e^{-(i/\hbar)(E_0-A)t}. \tag{7.11}$$

Нека сега умножим (7.10) с вектора $|I\rangle$; получаваме

$$|I\rangle\langle I|\psi_I\rangle=|I\rangle e^{-(i/\hbar)(E_0+A)t}.$$

Като имаме пред вид, че $|I\rangle\langle I|=1$, получаваме

$$|\psi_I\rangle=\hbar_{II}|\rangle e^{-(i/\hbar)(E_0+A)t}.$$

С други думи, векторът на състояние за стационарното състояние $|\psi_I\rangle$ не се различава от вектора на състояние за базисното състояние $|I\rangle$ по нищо, освен с експоненциалния множител, свързан с енергията на състоянието. И наистина, при $t=0$ ще имаме

$$|\psi_I\rangle=|I\rangle.$$

Така физичната конфигурация за състоянието $|I\rangle$ е същата, както и за стационарното състояние с енергия E_0+A. По същия начин, за второто стационарно състояние се получава

$$|\psi_{II}\rangle=|II\rangle e^{-(i/\hbar)(E_0-A)t}.$$

Състоянието $|II\rangle$ е също стационарно с енергия E_0-A при $t=0$. Така достигаме до извода, че и двете нови базисни състояния $|I\rangle$ и $|II\rangle$ имат вид на състояния с определена енергия, но без експоненциалния временен множител, и могат да бъдат приети за базисни състояния. (По-нататък ще бъде удобно да не правим разлика между стационарните състояния $|\psi_I\rangle$ и $|\psi_{II}\rangle$ и базисните състояния $|I\rangle$ и $|II\rangle$, понеже те се различават само с очевидния временен множител.

И така, векторите на състояние $|I\rangle$ и $|II\rangle$ са двата базисни вектора, пригодени да описват състоянията на молекулата на амоняка с определена енергия. Те са свързани с изходните базисни вектори чрез формулите

$$|I\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\Big[|1\rangle-|2\rangle\Big], \quad |II\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\Big[|1\rangle+|2\rangle\Big]. \tag{7.12}$$

Амплитудите за пребиваване в $|I>$ и $|II>$ са свързани със C_1 и C_2 чрез формулите

$$C_I = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[C_1 - C_2\right], \qquad C_{II} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[C_1 + C_2\right]. \tag{7.13}$$

Всяко състояние може да бъде представено като линейна комбинация на $|1>$ и $|2>$ (с коефициенти C_1 и C_2) или като линейна комбинация на базисните състояния с определена енергия $|I>$ и $|II>$ (с коефициенти C_I и C_{II}). Така

$$|\Phi> = |1> C_1 + |2> C_2$$

или

$$|\Phi> = |I> C_I + |II> C_{II}\,.$$

Втората формула ни дава амплитудата за намиране на състоянието $|\Phi>$ в състояние с енергия $E_I = E_0 + A$ или в състояние с енергия $E_{II} = E_0 - A$.

7-2. Молекулата на амоняка в статично електрично поле

Ако молекулата на амоняка се намира в едно от двете състояния с определена енергия и приложим външно смущение с честота ω, такава, че $\hbar\omega = E_I - E_{II} = 2A$, системата може да премине от долното енергетично състояние в горното. Може да стане и обратното — да премине от горното състояние в долното със излъчване на фотон. За възбуждането на такива преходи обаче необходимо е да има физична връзка със състоянията — за да внесем смущение в системата. Трябва да съществува някакъв външен механизъм за влияние върху състоянията, например електрично или магнитно поле. В нашия частен случай тези състояния са чувствителни към електрично поле. Сега пред нас се поставя задачата да разгледаме поведението на амонячната молекула във външно електрично поле.

За разглеждането на тази задача нека пак се върнем към началната базисна система $|1>$ и $|2>$, вместо $|I>$ и $|II>$. Да предположим, че посоката на приложеното електрично поле е перпендикулярна на равнината на водородните атоми. Нека за момент да пренебрегнем възможността за прехода „долу-горе“ на атома на азота и се запитаме: вярно ли е, че енергията на тази молекула и в двете положения на атома на азота е еднаква? Изобщо казано — не. Електроните се стремят да бъдат по-близо до ядрото на азота, отколкото до ядрата на водорода, така че водородът се оказва зареден слабо положително. Колко — това зависи от точното разположение на електроните. Трудно е да си представим какво е точното разположение на молекулите, но във всеки случай крайният резултат е наличието на диполен момент на амонячната молекула, както това е показано на фиг. 7.1. С негова помощ можем да продължим по-нататъшния анализ, без да се интересуваме от подробности за посоката и големината на отместването на електричните заряди. Впрочем, за да не се отличават нашите означения с общоприетите, нека предположим, че електричният диполен момент е равен на $\vec{\mu}$ и насочен перпендикулярно *от* атома на азота към равнината на водородните атоми.

Когато азотът преминава от едната страна на другата центърът на масата не се изменя, а се обръща електричният диполен момент. В резултат — енергията в електрично поле $\mathcal{E}$ зависи от ориентацията на молекулите[1]. При това приемаме, че потенци-

[1] Много съжаляваме, но ще се наложи да въведем нови означения. Макар че досега с буквите p и E означавахме импулса и енергията, ще рискуваме с тях да означим и диполния момент и електричното поле. Освен това нека напомним, че в този параграф с μ ще означаваме *електричния* диполен момент.

алната енергия ще бъде по-голяма, когато атомът на азота е отдалечен от равнината на водородните атоми в посока на електричното поле, и по-малък, когато е отместен в обратна посока; разликата между двете енергии ще бъде равна на $2\mu\mathcal{E}$.

Дотук бяхме принудени да правим предположения за големините на E_0 и A, понеже не знаехме как да ги изчисляваме. В една строга физична теория е необходимо да съществува възможност да бъдат изчислявани всички такива константи, ако са известни положенията и движенията на ядрата и електроните, но досега никой не е успял да направи това. В разглежданата от нас система влизат десет електрона и четири ядра и задачата е много сложна. Затова фактически никой не знае повече за молекулата на амоняка, отколкото ние с вас. Все пак едно се знае — в електрично поле енергиите на двете състояния на тази молекула се различават и разликата в енергиите е пропорционална на електричното поле. С 2μ означихме коефициента на пропорционалност, но той трябва да бъде определен опитно. Също може да се каже, че молекулата има амплитуда A да се преобърне, но и тя трябва да се измери опитно. Никой няма да ни подскаже точните теоретични стойности на μ и A, защото тяхното пресмятане е много трудно и никой не го е правил досега.

Сега се налага малко да изменим описанието на амонячната молекула в електричното поле. Ако пренебрегнем амплитудата за преминаване на молекулата от една конфигурация в друга, енергиите на двете състояния $|1>$ и $|2>$ ще бъдат равни на $(E_0+\mu)$. Следвайки приетата в предишната глава процедура, трябва да положим

$$H_{11}=E_0+\mu\mathcal{E}, \qquad H_{22}=E_0-\mu\mathcal{E}. \tag{7.14}$$

Освен това нека предположим, че при интересуващите ни електрични полета самите полета не влияят забележимо върху геометрията на молекулите и по такъв начин и върху амплитудата за преминаване на азота от едно в друго положение. Ето защо можем да приемем, че H_{12} и H_{21} не са се изменили, т. е.

$$H_{12}=H_{21}=-A. \tag{7.15}$$

Сега трябва да решим хамилтоновото уравнение (6.43) с тези нови стойности на H_{ij}. Бихме могли да решим и тези частни случаи, както сме правили и по-рано това, но, както се очертава, често ще ни се налага да имаме работа с подобни системи с две състояния, затова нека ги решим веднаж завинаги за общия случай на произволни H_{ij}, приемайки само, че те не се менят с времето.

Търсим общото решение на двойката хамилтонови уравнения

$$i\hbar\frac{dC_1}{dt}=H_{11}C_1+H_{12}C_2, \tag{7.16}$$

$$i\hbar\frac{dC_2}{dt}=H_{21}C_1+H_{22}C_2. \tag{7.17}$$

Това са линейни диференциални уравнения с постоянни коефициенти. Следователно винаги могат да се намерят решения, които представляват експоненциални функции на независимата променлива t. Нека отначало потърсим решения, в които C_1 и C_2 зависят еднакво от времето; да опитаме с функциите

$$C_1=a_1e^{-i\omega t}, \qquad C_2=a_2e^{-i\omega t}.$$

Понеже тези решения отговарят на състояние с енергия $E=\hbar\omega$, можем да положим направо

$$C_1=a_1e^{-(i/\hbar)\,Et}, \tag{7.18}$$

$$C_2=a_2e^{-(i/\hbar)\,Et}, \tag{7.19}$$

където засега E не е известно и трябва да бъде определено така, че диференциалните уравнения (7.16) и (7.17) да бъдат удовлетворени.

При заместване на C_1 и C_2 от (7.18) и (7.19) в диференциалните уравнения (7.16) и (7.17) производните дават $-iE/\hbar$, умножени на C_1 или C_2, така че отляво остават EC_1 или EC_2. Съкращавайки общите експоненциални множители, получаваме

$$Ea_1 = H_{11}a_1 + H_{12}a_2, \qquad Ea_2 = H_{21}a_1 + H_{22}a_2$$

или след елементарни преобразования

$$(E - H_{11})\ a_1 - H_{12}a_2 = 0, \tag{7.20}$$

$$-H_{21}a_1 + (E - H_{22})\ a_2 = 0. \tag{7.21}$$

За такава система хомогенни алгебрични уравнения ще имаме ненулеви решения за a_1 и a_2 само тогава, когато детерминантата, съставена от коефициентите пред a_1 и a_2, е равна на нула, т. е.

$$\begin{vmatrix} E - H_{11} & -H_{12} \\ -H_{21} & E - H_{22} \end{vmatrix} = 0. \tag{7.22}$$

Но когато имаме работа с две уравнения с две неизвестни можем да минем и без тази „голяма теория". Всяко от уравненията (7.20) и (7.21) определя отношение на двата коефициента a_1 и a_2 и тези отношения трябва да бъдат равни. От (7.20) имаме

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{H_{12}}{E - H_{11}}, \tag{7.23}$$

а от (7.21)

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{E - H_{22}}{H_{21}}. \tag{7.24}$$

Като приравним тези отношения, получаваме, че E трябва да удовлетворява равенството.

$$(E - H_{11})\,(E - H_{22}) - H_{12}H_{21} = 0.$$

Същото би се получило и от (7.22). И в двата случая за E се получава квадратно уравнение с две решения

$$E = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12}\,H_{21}}. \tag{7.25}$$

Така енергията E може да има две стойности. Обърнете внимание, че и двете стойности са *реални*, защото H_{11} и H_{22} са реални, а $H_{12}H_{21}$, което е равно на $H_{12}H_{12}^{*} = |H_{12}|^2$, е също реално и освен това, положително.

Въз основа на старите споразумения ще означаваме по-голямата енергия E_I, а по-малката — с E_{II}. Имаме

$$E_I = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} + \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}}, \tag{7.26}$$

$$E_{II} = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} - \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}}. \tag{7.27}$$

Замествайки всяка от тези енергии поотделно в (7.18) и (7.19), ще получим амплитудите за тези две стационарни състояния (състояния с определена енергия). Ако няма външни смущения, намиращата се в едно от тези две състояния система ще остане винаги в нея, като ще се мени само фазата.

Получените резултати могат да се проверят за два частни случая. Ако $H_{12} = H_{21} = 0$, ще получим $E_I = H_{11}$ и $E_{II} = H_{22}$. А това безспорно е вярно, понеже тогава уравненията (7.16) и (7.17) не са свързани и всяко от тях представя състояние с енергия H_{11} или H_{22}. По-нататък полагайки $H_{11} = H_{22} = E_0$ и $H_{21} = H_{12} = -A$ достигаме до познатото вече решение

$$E_I = E_0 + A \quad \text{и} \quad E_{II} = E_0 - A\,.$$

В общия случай двете решения се отнасят за две състояния, които отново можем да наречем състояния

$$|\psi_I> = |I> e^{-(i/\hbar)E_I t}, \quad |\psi_{II}> = |II> e^{-(i/\hbar)E_{II} t}\,.$$

За тези състояния C_1 и C_2 ще се дават от уравненията (7.18) и (7.19), където a_1 и a_2 подлежат на определяне. Те трябва да удовлетворяват и едно друго условие. Ако е известно, че системата се намира в едно от стационарните състояния, то сумата от вероятностите тя да се окаже в състояние $|1>$ или в състояние $|2>$ трябва да бъде равна на единица. Следователно

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1 \tag{7.28}$$

или което е същото

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1. \tag{7.29}$$

Тези условия не определят a_1 и a_2 еднозначно: остава още произвол във фазите, т. е. в множителя от вида $e^{i\delta}$. Макар че за a могат да се напишат общи решения[1], по-удобно е те да бъдат изчислявани за всеки отделен случай.

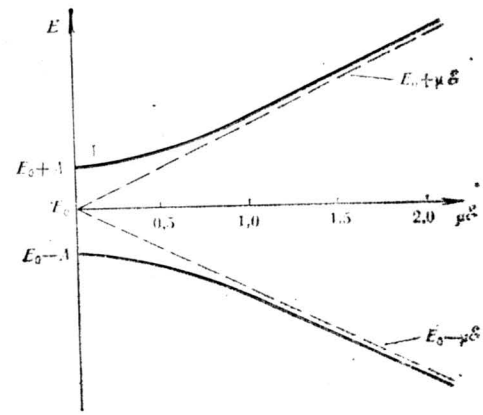
Да се върнем сега към нашия частен пример за молекулата на амоняка в електрично поле. Използувайки стойностите на H_{11}, H_{22} и H_{12} от (7.14) и (7.15), получаваме за енергията на тези стационарни състояния изразите

$$E_I = E_0 + \sqrt{A^2 + \mu^2 \mathcal{E}^2}, \quad E_{II} = E_0 - \sqrt{A^2 + \mu^2 \mathcal{E}^2}. \tag{7.30}$$

На фиг. 7.2 са показани тези две енергии като функция на силата на електричното поле $\mathcal{E}$. Когато електричното поле е нула, естествено енергията става $E_0 \pm A$. Прилагането на електрично поле води до увеличаване на разцепването на енергетичните нива. Отначало при малки $\mathcal{E}$ то расте бавно, докато при големи стойности на $\mathcal{E}$ разстоянието между нивата расте пропорционално на $\mathcal{E}$. В свръхсилни полета енергиите са равни съответно на

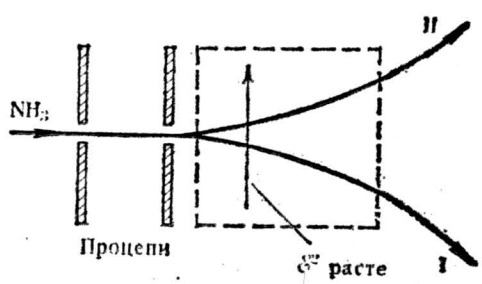
$$E_I = E_0 + \mu\mathcal{E} = H_{11}, \quad E_{II} = E_0 - \mu\mathcal{E} = H_{22}. \tag{7.31}$$

Фактът, че за азота в амонячната молекула съществува амплитуда за преходи „горе-долу", не много съществен, когато енергиите на тези две състояния се различават силно. Това е интересен момент, към който ще се върнем малко по-късно.



Фиг. 7.2. Енергетични нива на амонячната молекула в електрично поле. Кривите са построени по формулите (7.30): $E = E_0 \pm \sqrt{A^2 + B^2}$

Сега вече сме в състояние да разберем действието на амонячния мазер. Първо, отделяме молекулите в състояние $|I>$ от молекулите в състояние $|II>$[2]. След това пропускаме молекулите от „горното" енергетично състояние $|I>$ през кухина с резонансна честота 24 000 MHz. Молекулите могат да оставят енергията си в нея (начинът ще бъде изложен по-късно) и да я напуснат в състояние $|II>$. Извършвайки такъв преход, всяка молекула предава на резонансната кухина енергия $E = E_I - E_{II}$. Отнетата от молекулите енергия се проявява като електрична енергия на кухината.



Фиг. 7.3. Сноп от молекули на амоняка може да бъде разделен от електрично поле, в което $\mathcal{E}^2$ притежава градиент, перпендикулярен на снопа

А как да разделим двете молекулни състояния? Един възможен начин е следният. Амонячен газ преминава във вид на тънка струя през два отвора, създаващи тесен процеп (фиг. 7.3). След това снопът се пропуска през област със силно напречно електрично поле. Създаващите полето електроди са така извити,

[1] Например, както лесно можем да се убедим, че едно от допустимите решения има вида:

$$a_1 = \frac{H_{12}}{[(E-H_{11})^2 + H_{12}H_{21}]^{1/2}}, \quad a_2 = \frac{E-H_{11}}{[(E-H_{11})^2 + H_{12}H_{21}]^{1/2}}\,.$$

[2] Сега пак ще пишем $|I>$ и $|II>$ вместо $|\psi_I>$ и $|\psi_{II}>$. Вие трябва да помните, че истинските състояния $|\psi_I>$ и $|\psi_{II}>$ са енергетичните базисни състояния, умножени на съответните експоненциални множители.

че електричното поле да се изменя силно. Тогава квадратът на електричиото поле $\mathscr{E}\,.\,\mathscr{E}$ ще има голям градиент, перпендикулярен на снопа. А за молекулите в състояние $|I>$ енергията расте с $\mathscr{E}^2$, следователно тази част от снопа ще се отклонява към областта на малките $\mathscr{E}^2$. Обратно, молекулите от състояние $|II>$ ще се отклоняват в посока на нарастване на $\mathscr{E}^2$, защото тяхната енергия ще намалява, когато $\mathscr{E}^2$ расте.

Впрочем при електричните полета, които се създават в лабораторни условия, енергията $\mu\mathscr{E}$ винаги е много по-малка от A. В този случай коренът на уравнението (7.30) е приблизително равен

$$A\left(1+\frac{1}{2}\ \frac{\mu^2\mathscr{E}^2}{A^2}\right). \tag{7.32}$$

Във всички практически случаи енергетичните нива са равни на

$$E_I = E_0+A+\frac{\mu^2\mathscr{E}^2}{2A}\ , \tag{7.33}$$

$$E_{II}=E_0-A-\frac{\mu^2\mathscr{E}^2}{2A} \tag{7.34}$$

и енергията зависи линейно от $\mathscr{E}^2$. Действуващата върху молекулата сила е равна на

$$\mathbf{F}=\frac{\mu^2}{2A}\ \nabla\mathscr{E}^2\ . \tag{7.35}$$

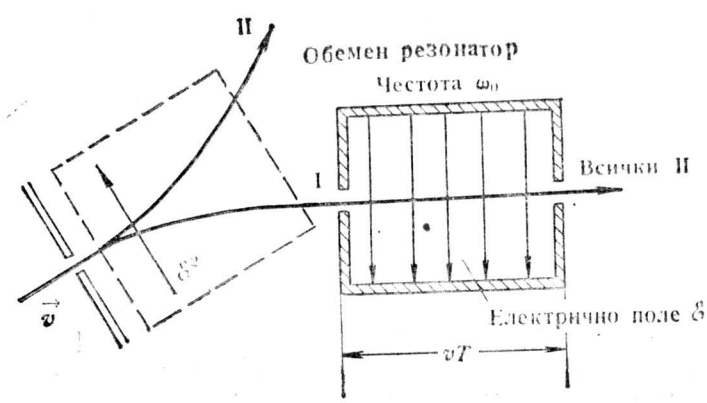
Енергията на много от молекулите в електрично поле е пропорционална на $\mathscr{E}^2$. Коефициентът пред $\nabla\mathscr{E}^2$ показва големината на поляризацията на молекулата. Поляризацията на амонячната молекула е необикновено голяма: при нея A в знаменателя е много малко. Затова молекулата на амоняка е много чувствителна към електричното поле.

7-3. Преходи в поле, зависещо от времето

В амонячния мазер снопът от молекули в състояние $|I>$ и с енергия E_I се пропуска през резонансна кухина, както това е показано на фиг. 7.4, а другият сноп се извежда навън. В резонансната кухина се създава променливо с времето електрично поле и сега задачата е да изучим поведението на амонячните молекули в подобно променливо поле. Това е съвсем нов вид задача — с изменящ се във времето хамилтониан. Щом H_{ij} зависи от $\mathscr{E}$, то и H_{ij} ще се изменя с времето и ние трябва да изследваме поведението на системата при тези обстоятелства.

Като начало нека пак напишем уравненията, които трябва да решаваме:

$$\begin{aligned} i\hbar\,\frac{dC_1}{dt} &= (E_0+\mu\mathscr{E})\,C_1-AC_2,\\ i\hbar\,\frac{dC_2}{dt} &= -AC_1+(E_0-\mu\mathscr{E})\,C_2. \end{aligned} \tag{7.36}$$



Фиг. 7.4. Схематично изобразяване на амонячен мазер

Нека положим за определеност, че електричното поле се изменя синусоидално; тогава можем да напишем

$$\mathcal{E}=2\,\mathcal{E}_0\cos\omega t=\mathcal{E}_0\,(e^{i\omega t}+e^{-i\omega t})\,. \tag{7.37}$$

В действителност честотата ω се подбира много близка до резонансната честота на молекулния преход $\omega_0=\frac{2A}{\hbar}$, но засега, за по-голяма общност, ще считаме ω за произволно. Най-добрият начин за решаване на тези уравнения е, както и по-рано, да съставим линейни комбинации от C_1 и C_2. Затова нека съберем двете уравнения, да разделим на $\sqrt{2}$ и си спомним за C_I и C_{II}, определени от (7.13). Получаваме

$$i\hbar\frac{dC_{II}}{dt}=(E_0-A)\,C_{II}+\mu\,\mathcal{E}\,C_I\,. \tag{7.38}$$

Вие виждате, че това уравнение прилича на (7.9), но поради наличието на електрично поле се появява добавъчен член. По същия начин, образувайки разликата между двете уравнения от (7.36) получаваме

$$i\hbar\frac{dC_I}{dt}=(E_0+A)\,C_I+\mu\,\mathcal{E}\,C_{II}. \tag{7.39}$$

Сега задачата е да решим тези уравнения. В сравнение с предишния случай, това е по-трудно, защото $\mathcal{E}$ зависи от времето; и наистина при общо $\mathcal{E}(t)$ решението не може да се представи с елементарни функции. Но ако електричното поле е слабо, може да се намери добро приближено решение. Затова нека отначало напишем

$$\begin{aligned}C_I&=\gamma_I\,e^{-i\,(E_0+A)\,t/\hbar}=\gamma_I\,e^{-i\,(E_I)\,t/\hbar},\\ C_{II}&=\gamma_{II}\,e^{-i\,(E_0-A)\,t/\hbar}=\gamma_{II}e^{-i\,(E_{II})\,t/\hbar}.\end{aligned} \tag{7.40}$$

При отсъствие на електрично поле, считайки γ_I и γ_{II} за две комплексни константи бихме получили верни решения. Щом като вероятността за пребиваване в състояние $|I>$ представлява квадратът на модула на C_I, а вероятността за пребиваване в $|II>$ — квадратът на C_{II}, то вероятността за пребиваване в състояние $|I>$ или в състояние $|II>$ ще бъде равна на $|\gamma_I|^2$ или на $|\gamma_{II}|^2$. Например ако системата беше започнала да се развива от състояние $|II>$ така, че $\gamma_I=0$, а $\gamma_{II}=1$, тези условия биха се запазили постоянно. Молекулите от състояние $|II>$ никога не биха преминавали в състояние $|I>$.

Ползата от записване на решенията във вида (7.40) е че те запазват вида си и тогава, когато действува електрично поле, стига $\mu\mathcal{E}$ да е по-малко от A; тогава γ_I и γ_{II} стават бавно изменящи се с времето функции. „Бавно изменяща се“ означава бавно *в сравнение* с експоненциалните функции. Това е целият фокус. За получаване на приблизителните решения се използува фактът, че γ_I и γ_{II} също се изменя бавно с времето.

Сега нека заместим C_I от (7.40) в диференциалното уравнение (7.39), но да не забравяме, че γ_I също зависи от времето. Ще имаме

$$i\hbar\frac{dC_I}{dt}=E_I\,\gamma_I\,e^{-i\,E_I\,t/\hbar}+i\hbar\frac{d\gamma_I}{dt}\,e^{-i\,E_I\,t/\hbar}\,.$$

Диференциалното уравнение ще добие вида

$$\left(E_I\,\gamma_I+i\hbar\frac{d\,\gamma_I}{dt}\right)e^{(i/\hbar)\,E_I\,t}=E_I\,\gamma_I\,e^{-(i/\hbar)\,E_I\,t}+$$
$$+\mu\,\mathcal{E}\,\gamma_{II}\,e^{-(i/\hbar)\,E_{II}\,t}\,. \tag{7.41}$$

По същия начин уравнението за $\frac{dC_{II}}{dt}$ ще стане

$$\left(E_{II}\,\gamma_{II}+i\hbar\frac{d\gamma_{II}}{dt}\right)e^{-(i/\hbar)\,E_{II}\,t}=E_{II}\,\gamma_{II}\,e^{-(i/\hbar)\,E_{II}\,t}+$$

$$+\mu\,\mathcal{E}\,\gamma_I\,e^{-(i/\hbar)\,E_I\,t}\,. \tag{7.42}$$

Обърнете внимание, че и в двете части на всяко от уравненията имаме еднакви членове. Да ги съкратим и след това да умножим първото уравнение на $e^{+i\,E_I\,t/\hbar}$, второто на $e^{+i\,E_{II}\,t/\hbar}$. Като вземем пред вид, че $(E_I-E_{II})=2A=\hbar\,\omega_0$, получаваме

$$\begin{aligned} i\hbar\,\frac{d\gamma_I}{dt}&=\mu\,\mathcal{E}\,(t)\,e^{i\,\omega_0\,t}\,\gamma_{II}\,,\\ i\hbar\,\frac{d\gamma_{II}}{dt}&=\mu\,\mathcal{E}\,(t)\,e^{-i\,\omega_0\,t}\,\gamma_I\,. \end{aligned} \tag{7.43}$$

Получи се доста проста система уравнения — и засега все още точна. Производната на едната променлива е функция на времето чрез $\mu\,\mathcal{E}\,(t)\,e^{i\,\omega_0\,t}$, умножена на втората променлива; производната на втората променлива е подобна функция на времето, умножена на първата променлива. Макар че това са прости уравнения, те не могат да бъдат решавани в общия случай. В някои частни случаи обаче ние ще ги решим.

Засега ние се интересуваме от случая на променливо електрично поле. Ако вземем $\mathcal{E}\,(t)$ във вида (7.37), ще установим, че уравненията за γ_I и γ_{II} добиват вида

$$\begin{aligned} i\hbar\,\frac{d\gamma_I}{dt}&=\mu\,\mathcal{E}_0\,[e^{i\,(\omega+\omega_0)\,t}+e^{-i\,(\omega-\omega_0)\,t}]\gamma_{II}\,,\\ i\hbar\,\frac{d\gamma_{II}}{dt}&=\mu\,\mathcal{E}_0\,[e^{i\,(\omega-\omega_0)\,t}+e^{-i\,(\omega+\omega_0)\,t}]\,\gamma_{II}\,, \end{aligned} \tag{7.44}$$

И ако сега $\mathcal{E}_0$ е достатъчно малко, то и скоростите на изменение на γ_I и γ_{II} ще бъдат достатъчно малки. И двете γ не ще се изменят силно с времето, особено в сравнение с бързите вариации, свързани с експоненциалните членове. Тези експоненциални членове притежават реални и имагинерни части, които се колебаят с честота $\omega+\omega_0$ или $\omega-\omega_0$. Членовете с честота $\omega+\omega_0$ се колебаят около средната стойност нула много бързо и затова не дават голям принос в скоростта на изменение на γ. Следователно може да се направи напълно разумно приближение, като се заместят тези членове със средната им стойност, т. е. с нула. Тези членове просто отпадат и като първо приближение могат да се вземат уравненията

$$\begin{aligned} i\hbar\,\frac{d\gamma_I}{dt}&=\mu\,\mathcal{E}_0\,e^{-i\,(\omega-\omega_0)\,t}\,\gamma_{II},\\ i\hbar\,\frac{d\gamma_{II}}{dt}&=\mu\,\mathcal{E}_0\,e^{i\,(\omega-\omega_0)\,t}\,\gamma_I\,. \end{aligned} \tag{7.45}$$

Но и сега, ако ω не е близко до ω_0, останалите членове ще се менят бързо с показатели, пропорционални на $\omega-\omega_0$. Само когато ω е близко до ω_0, дясната страна ще се изменя достатъчно бавно, така че да може да интегрираме тези уравнения по t. С други думи, при *слабо* електрично поле влияние ще оказват само онези честоти, които са близки до ω_0.

След приближенията, които направихме, за да получим (7.45), тези уравнения могат да бъдат решени точно, но все пак работата е трудоемка и ние ще я отложим за по-нататък, когато ще се срещнем с друга подобна задача. Засега ще ги решим приблизително или, казано по-добре, ще намерим точното решение за случая на идеален резонанс, когато $\omega=\omega_0$ и приблизително решение за честоти, близки до резонанса.

7-4. Резонансни преходи

Отначало да разгледаме случая на идеален резонанс. Ако положим $\omega=\omega_0$, експонентите и в двете уравнения ще станат равни на единица и ще имаме

$$\frac{d\gamma_I}{dt}=-\frac{i\mu\mathscr{E}_0}{\hbar}\gamma_{II},\qquad \frac{d\gamma_{II}}{dt}=-\frac{i\mu\mathscr{E}_0}{\hbar}\gamma_I. \tag{7.46}$$

Ако от тези уравнения изключим отначало γ_I, а след това и γ_{II}, ще видим, че всяко от тях удовлетворява диференциалното уравнение за хармонично движение:

$$\frac{d^2\gamma}{dt}=-\left(\frac{\mu\mathscr{E}_0}{\hbar}\right)^2\gamma. \tag{7.47}$$

Общото решение на това уравнение може да бъде съставено от функциите синус и косинус. Лесно се проверява, че решения представляват следните изрази

$$\begin{aligned}\gamma_I&=a\cos\left(\frac{\mu\mathscr{E}_0}{\hbar}\right)t+b\sin\left(\frac{\mu\mathscr{E}_0}{\hbar}\right)t,\\ \gamma_{II}&=ib\cos\left(\frac{\mu\mathscr{E}_0}{\hbar}\right)t-ia\sin\left(\frac{\mu\mathscr{E}_0}{\hbar}\right)t,\end{aligned} \tag{7.48}$$

където a и b са константи, които трябва да определим така, че решенията да съответствуват на една или друга физична ситуация.

Като пример нека предположим, че при $t=0$ системата е била в горното енергетично състояние $|I>$, което изисква [въз основа на уравнение (7.40)] $\gamma_I=1$ и $\gamma_{II}=0$. За подобен случай трябва да имаме $a=1$ и $b=0$. Вероятността в някакъв по-късен момент t молекулата да се окаже пак в същото състояние $|I>$ е равна на квадрата на модула на γ_I, т. е.

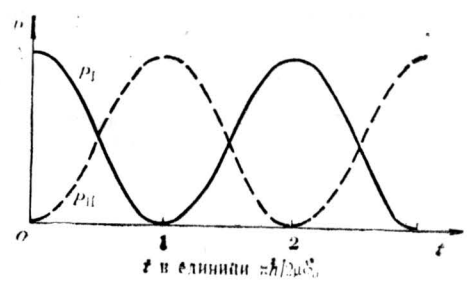
$$P_I=|\gamma_I|^2=\cos^2\left(\frac{\mu\mathscr{E}_0}{\hbar}\right)t. \tag{7.49}$$

По същия начин вероятността молекулата да се окаже в състояние $|II>$ ще се дава с квадрата на модула на γ_{II}:

$$P_{II}=|\gamma_{II}|^2=\sin_2\left(\frac{\mu\mathscr{E}_0}{\hbar}\right)t. \tag{7.50}$$

Докато $\mathscr{E}_0$ е малко и системата се намира в резонанс, вероятността се дава от прости хармонични функции. Вероятността за пребиваване в състояние $|I>$ намалява от единица до нула и след това отново нараства до единица, а вероятността за пребиваване в състояние $|II>$ расте от нула до единица и след това обратно — намалява до нула. Изменението на двете вероятности с времето е показано на фиг. 7.5. Не е необходимо специално да се изтъква, че сумата от двете вероятности винаги е равна на единица; та нали молекулата винаги се намира в *някое* от състоянията.

Да приемем, че преминаването през резонансната кухина става за време T. Ако тази кухина се направи толкова дълга, че да е изпълнено условието $\mu\mathscr{E}_0\frac{T}{\hbar}=\frac{\pi}{2}$, навлизащата в нея молекула в състояние $|I>$ ще излиза в състояние $|II>$. Ако молекулата е попаднала в кухината в горното енергетично състояние, тя ще излезе от нея в долното енергетично състояние. С други думи, нейната енергия пада и отдадената енергия може да премине само в механизма, който генерира поле. Подробното разглеждане на това как се предава енергията от молекулите на полето в кухината не е толкова проста работа; обаче за нас тези подробности не са и необходими, защото винаги можем да се позовем на закона за запазване на енергията. (Бихме могли, ако това беше наложително, да изучим и тази част от проблема, но тогава щеше да се наложи да работим с квантовата механика на електромагнитното поле



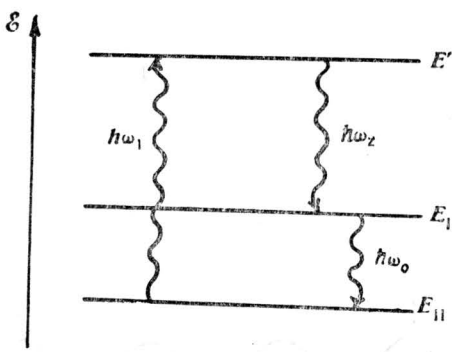
Фиг. 7.5. Вероятности за двете състояния на амонячната молекула в синусоидално електрично поле

на резонансната кухина, наред с квантовата механика на атома която изучаваме сега.)

И така: молекулата навлиза в резонансната кухина, полето на която трепти с необходимата честота; то индуцира преходи от горното енергетично състояние в долното и освободената енергия подхранва осцилиращото поле. В работещ мазер молекулите доставят енергия, достатъчна не само за поддържане на колебанията на полето в кухината, но и за извличане на неголеми излишъци от нея. Така енергията на молекулите се превръща в енергия на външното електромагнитно поле.

Да си спомним, че пред входа на резонансната кухина бяхме поставили филтър, който разделяше снопа така, че в кухината попадат само молекули в горното енергетично състояние. Лесно се показва, че ако започвахме с молекули от долното енергетично ниво, процесът би протекъл в обратна посока и енергията на резонансната кухина щеше да намалява. Ако пък в кухината се пусне нефилтриран сноп, то колкото молекули отдават енергия, толкова и ще получават, и в крайна сметка не се получава нищо ново. При истинския работещ мазер не е задължително ($\mu\mathscr{E}_0 T/\hbar$) да бъде точно равно на $\frac{\pi}{2}$. И при други стойности (освен точно кратните на π) съществува някаква вероятност за преходи между състоянията. Но при тези случаи приборът вече няма к. п. д., равен на 100%; много от молекулите напускат резонансната кухина, без да изменят състоянието си.

В действителност скоростите на молекулите не са еднакви; те имат Максвелово разпределение. Оттук следва, че идеалните времена на различните молекули ще бъдат различни и е невъзможно да се получи мазер с к. п. д., равен на 100%. При това има още едно усложнение, което наистина може лесно да се вземе под внимание, но на този етап няма да се занимаваме с него. Вие помните, че обикновено електричното поле се мени с мястото. Понеже съществува някакъв дрейф на молекулите в кухината, електричното поле за тях ще се изменя по някакъв по-сложен начин, отколкото предполаганото от нас синусоидално колебание. Ясно е, че за точното решаване на задачата би следвало да се използуват по-сложни интегрирания, но общата идея си остава същата. Мазерът може да бъде направен и по друг начин. Не да се филтрират атомите с прибор на Щерн — Герлах, а да се съберат заедно в резонансната кухина (в газообразен или твърд вид) и по някакъв начин да се преселят от състояние $|II>$ в състояние $|I>$. Един подобен начин е използуването на мазер с три енергетични състояния. За целта се използуват атомни системи с три енергетични нива (фиг. 7.6) и със следните специфични свойства. Системата поглъща лъчение (например светлина) с енергия $\hbar w_1$ и преминава от най-ниското енергетично ниво E_{II} в някакво по-високо ниво E', а след това бързо изпуска фотон с енергия $\hbar w_2$ и преминава в състояние $|I>$ с енергия E_I. Това състояние има по-дълъг живот, така че неговата населяемост може да расте и по такъв начин се създават условия, благоприятни за работа на мазера между състоянията $|I>$ и $|II>$. Макар и такъв прибор да се нарича мазер „с три нива“, самият физически процес се извършва по описания вече начин за система с две нива.



Фиг. 7.6. Енергетични нива на мазер с три състояния

Лазерът пък е всъщност мазер, работещ на честотата на видимата светлина. „Резонансната кухина“ на лазера се състои от две огледала, между които се генерират стоящи вълни.

7-5. Нерезонансни преходи

На края бихме искали да изясним как се изменят състоянията, когато честотата на резонансната кухина, макар и близка до ω_0, не съвпада с нея. Тази задача може да се реши точно, но ние няма да се заемем с това, а нека се обърнем към важния случай, когато имаме слабо електрично поле и малък временен интервал T, така че $\mu\mathscr{E}_0 T/\hbar$ е много по-малко от единица. Тогава, даже в

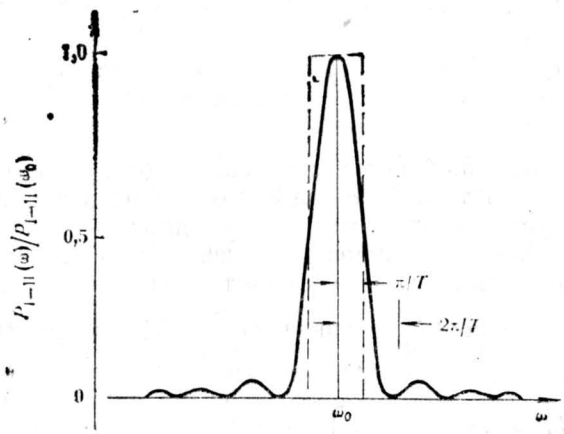
случай на идеален резонанс, вероятността за преход е много малка. Пак ще тръгнем от условието $\gamma_I = 1$ и $\gamma_{II}=0$. В такъв случай сме в правото си да очакваме, че през цялото време T стойността на γ_I остава близка до единица, а γ_{II} е малко в сравнение с γ_I, а това облекчава задачата. От второто уравнение (7.45) можем да пресметнем γ_{II}, приемайки γ_I равно на единица, и интегрираме от $t=0$ до $t=T$. Така получаваме

$$\gamma_{II}=\frac{\mu\mathscr{E}_0}{\hbar}\left[\frac{1-e^{i(\omega-\omega_0)T}}{\omega-\omega_0}\right]. \qquad (7.51)$$

Това е стойността на γ_{II}, която стои в (7.40), и тя дава вероятността за това, преходът от състояние $|I>$ в състояние $|II>$ да се извърши за време T. Вероятността $P\ (I\to II)$ за такъв преход е равна на $|\gamma_{II}|^2$, т. е.

$$P\ (I\to II)=|\gamma_{II}|^2=\left[\frac{\mu\mathscr{E}_0 T}{\hbar}\right]^2\frac{\sin^2\left[(\omega-\omega_0)\frac{T}{2}\right]}{[(\omega-\omega_0)\ T/2]^2}. \qquad (7.52)$$

Интересно е да се начертае тази вероятност при фиксирано T като функция на честотата на резонансната кухина, за да се види нейната чувствителност към честоти, близки до ω_0. Кривата $P\ (I\to II)$ е показана на фиг. 7.7. (Вертикалният мащаб е избран така, че височината на максимума да е единица. За целта



Фиг. 7.7. Вероятността за преход на амонячната молекула във функция от честотата

сме разделили на големината на вероятността при $\omega=\omega_0$. С подобни криви сме се срещали в теорията на дифракцията. Вероятността пада рязко до нула при $(\omega-\omega_0)=\frac{2\pi}{T}$ и никога при по-големи отклонения на честотата не достига забележима големина. Почти цялата площ под кривата лежи в границите на $\pm\frac{\pi}{T}$. Може да се покаже (с помощта на формулата $\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\sin^2 x}{x^2}\right)dx=\pi$), че площта под кривата е равна на 2π и съвпада с площта на отделения с пунктирана линия правоъгълник.

Нека видим какво дава това за реалния мазер. Да вземем разумно време за пребиваване на амонячната молекула в резонансната кухина, например 1 ms. Тогава за $f_0=24\,000$ MHz може да се пресметне, че вероятността пада до нула при отклонение $\frac{f-f_0}{f_0}=\frac{1}{f_0 T}$, което е от порядъка на $5\,.\,10^{-8}$. Очевидно е, че за да получим наблюдаеми вероятности за преход, честотите трябва да съвпадат много точно с ω_0. Този ефект обуславя голямата точност на „атомните“ часовници, работещи на принципа на мазера.

7-6. Поглъщане на светлина

Изложеното дотук е приложимо и към по-общ случай, отколкото амонячния мазер. Та нали ние изучаваме поведението на молекулите в електрично поле независимо от това, поставени ли са те в резонансна кухина, или не. Би могло да се насочи сноп „светлина" от микровълновия диапазон върху молекулите и се изследва вероятността за излъчване или поглъщане. Уравненията са напълно приложими и в този случай, но по-добре ще бъде да ги изразим с езика на *интензитета* на лъчението, а не на интензитета на електричното поле. Ако интензитетът $\mathcal{I}$ се определи като среден поток на енергия, падаща върху единица площ за една секунда, от казаното в гл. 27 (т. II) следва

$$\mathcal{I}=\varepsilon_0 c^2 \,|\, \mathscr{E}\times\mathbf{B}\,|_{\text{ср}}=\frac{1}{2}\,\varepsilon_0 c^2\,(\mathscr{E}\times\mathbf{B})_{\max}=2\,\varepsilon_0 c^2\,\mathscr{E}_0^2 .$$

Максимумът на $\mathscr{E}$ е равен на $2\mathscr{E}_0$.) Сега вероятността за преход добива вида

$$P\,(I\to II)=2\pi\left[\frac{\mu^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 c}\right]\mathcal{I}\,T^2\,\frac{\sin^2[(\omega-\omega_0)\,T/2]}{[(\omega-\omega_0)\,T/2]^2}\,. \qquad (7.53)$$

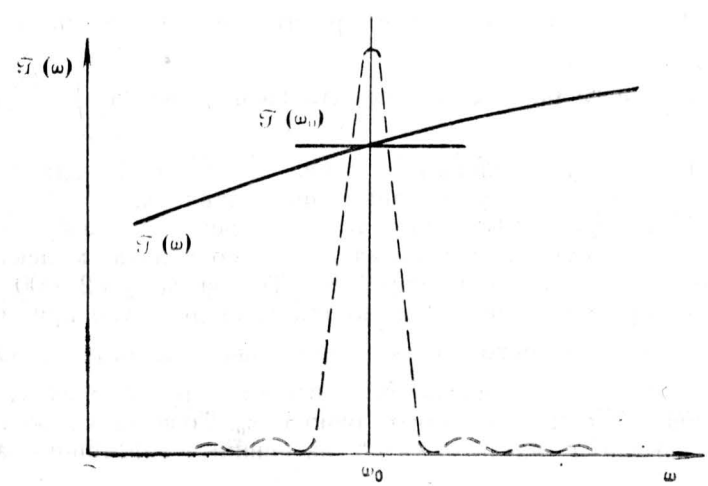
Обикновено светлината, осветяваща подобна система, не е съвсем монохроматична. Затова е интересно да се реши още една задача — да се пресметне вероятността за преход, когато интензитетът на светлината за единица интервал от честоти е равен на $\mathcal{I}(\omega)$ и покрива широка ивица, включваща ω_0. Тогава вероятността за преходи $|I>\to|II>|$ ще се дава от интеграла

$$P\,(I\to II)=2\pi\left[\frac{\mu^2}{4\pi\hbar^2\varepsilon_0 c}\right]T^2\int_0^\infty \mathcal{I}\,(\omega)\,\frac{\sin^2[(\omega-\omega_0)\,T/2]}{[(\omega-\omega_0)\,T/2]^2}\,.$$

По начало $\mathcal{I}(\omega)$ се мени по-бавно в сравнение с острия резонансен множител. Видът на тези функции е показан на фиг. 7.8. В такива случаи $\mathcal{I}(\omega)$ може да се замени със стойността на $\mathcal{I}(\omega)$ в центъра на острата резонансна крива и се изнесе вън от интеграла. Интегралът, който остава, дава площта под кривата на фиг. 7.7, която, както е известно, е равна на $\frac{2\pi}{T}$. И така достигаме до извода, че

$$P(I\to II)=4\pi^2\left[\frac{\mu^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2 c}\right]\mathcal{I}(\omega_0)\;T. \qquad (7.55)$$

Това е много важен резултат: *пред нас е общата теория за поглъщане на светлина от всяка молекулна или атомна система.* Макар отначало да считахме, че състоянието $|I>$ притежава по-голяма енергия от състоянието $|II>$, никъде разсъжде-



Фиг. 7.8. Спектралният интензитет $\Gamma(\omega)$ може да бъде представен чрез стойността си при ω_0

нията ни не зависеха от това. Уравнение (7.55) е валидно и когато енергията на състоянието $|I>$ е *по-малка* от енергията на състоянието $|II>$; тогава $P(I \to II)$ представлява вероятността за преход с *поглъщане* на енергия от падащата електромагнитна вълна. Поглъщането на светлина от атомна система предполага винаги съществуването на амплитуди за преходи между състояния, различаващи се с енергия $E = \hbar\omega$. Във всеки отделен случай вероятността се представя с израз, подобен на (7.55). Затова нека изтъкнем следните свойства на тази формула. Първо, вероятността е пропорционална на T. С други думи, съществува неизменна вероятност преходът да се извърши за единица време. Второ, тази вероятност е пропорционална на *интензитета* на падащата върху системата светлина. Трето, вероятността за преход е пропорционална на μ^2, където, както помните, $\mu\mathscr{E}$ означава енергетичното отместване, предизвикано от електричното поле $\mathscr{E}$. Именно по тази причина $\mu\mathscr{E}$ се появява в уравнения (7.38) и (7.39) като коефициент на свързване, отговарящ за преходи между стационарните състояния $|I>$ и $|II>$. С други думи, за разглежданите от нас малки $\mathscr{E}$ членът $\mu\mathscr{E}$ представлява т. нар. „смущение" в матричния елемент на хамилтониана, свързващ състоянията $|I>$ и $|II>$. В общия случай $\mu\mathscr{E}$ би се заменило с матричния елемент $<II|H|I>$ (вж. гл. 3, § 6).

В гл. 42, § 5 (вж. т. I) ние говорихме за връзката между поглъщането на светлина, принуденото излъчване и спонтанното излъчване в термините на въведените от Айнщайн коефициенти A и B. Тук най-накрая имаме вече на разположение квантово-механичната процедура за пресмятане на тези коефициенти. Това, което означихме с $P(I \to II)$ за нашия амонячен мазер с две енергетични нива точно съответстват на коефициентите на поглъщане B_{nm} в Айнщайновата теория на излъчването. Поради сложността на амонячната молекула — сложна за пресмятания — ни се наложи да вземем матричния елемент $<II|H|I>$ във вида $\mu\mathscr{E}$ и да казваме, че μ се определя от експеримента. За по-прости атомни системи величината μ_{nm}, отговаряща за произволен преход, може да се пресметне въз основа на връзката

$$\mu_{nm}\mathscr{E} = <m|H|n> = H_{mn}, \tag{7.56}$$

където H_{nm} е матричният елемент на хамилтониана, отчитащ влиянието на слабото електрично поле. Величината μ_{nm}, изчислена по такъв начин, се нарича *електричен диполен матричен елемент*. Така че квантово-механичната теория за поглъщане и изпускане на светлина се свежда до пресмятане на матричните елементи за едни или други атомни системи.

И така изучаването на прости системи с две състояния (две енергетични нива) ни доведе до запознаване с общия проблем за поглъщане и излъчване на светлина.

8

Други системи с две състояния

8-1. Ион на водородната молекула

8-2. Ядрени сили

8-3. Водородна молекула

8-4. Молекула на бензола

8-5. Багрила

8-6. Хамилтониан на частица със спин 1/2 в магнитно поле

8-7. Въртящ се електрон в магнитно поле

8-1. Йон на водородната молекула

В предишната глава обсъдихме някои свойства на молекулата на амоняка при предположение, че тя представлява система с две състояния или система с две енергетични нива. (Разбира се, в действителност това съвсем не е така — тя има много състояния: въртения, трептения, премествания и т. н., но за всяко от тези състояния трябва да имаме пред вид двойка вътрешни състояния, свързани с възможността атомът на азота да се прехвърля от едната страна на равнината на водородните атоми на другата. Сега ще разгледаме други примери за системи, които в едно или друго приближение могат да се считат за система с две състояния. При тези разглеждания много от нещата ще бъдат приближени, понеже винаги съществуват множество други възможни състояния и при по-точен анализ би следвало да бъдат отчитани. Но във всички тези примери ще можем да разберем много неща, като разсъждаваме само за две състояния.

Понеже ще работим само със системи с две енергетични нива, необходимият ни хамилтониан ще изглежда както в предишната глава. Когато хамилтонианът не зависи от времето, е известно, че съществуват две стационарни състояния с определени (и обикновено различни) енергии. Но в общия случай ще започнем анализа с избора на базисни състояния (*не е задължително* това да са тези стационарни състояния), които да имат друг прост физически смисъл. Тогава стационарните състояния на системата ще бъдат представени като линейни комбинации на тези базисни състояния.

За удобство да резюмираме най-важните уравнения, изведени в гл. 7. Нека първоначално за базисни състояния да сме избрали $|1>$ и $|2>$. Тогава всяко състояние $|\psi>$ ще се представя като тяхна линейна комбинация:

$$|\psi> = |1><1|\psi> + |2><2|\psi> = |1>C_1 + |2>C_2. \quad (8.1)$$

Амплитудите C_i (т. е. C_1 и C_2) удовлетворяват двете линейни диференциални уравнения

$$i\hbar \frac{dC_i}{dt} = \sum_j H_{ij} C_j , \quad (8.2)$$

където i и j приемат стойностите 1 и 2.

Когато членовете на хамилтониана H_{ij} не зависят от t, двете състояния с определени енергии, които ще означаваме

$$|\psi_I> = |I> e^{-(i/\hbar)E_I t}$$

и

$$|\psi_{II}> = |II> e^{-(i/\hbar)E_{II} t},$$

притежават енергии

$$E_I = \frac{H_{11}+H_{22}}{2} + \sqrt{\left(\frac{(H_{11}-H_{22})}{2}\right)^2 + H_{12}H_{21}} ,$$

$$E_{II} = \frac{H_{11}+H_{22}}{2} - \sqrt{\left(\frac{H_{11}-H_{22}}{2}\right)^2 + H_{12}H_{21}} . \quad (8.3)$$

За всяко от тези две състояния и двете C имат еднаква за-

висимост от времето. Векторите на състоянията $|I>$ и $|II>$, които съответствуват на стационарните състояния, са свързани с нашите първоначални базисни състояния $|1>$ и $|2>$ чрез формулите

$$|I> = |1> a_1 + |2> a_2,$$
$$|II> = |1> a'_1 + |2> a'_2. \qquad (8.4)$$

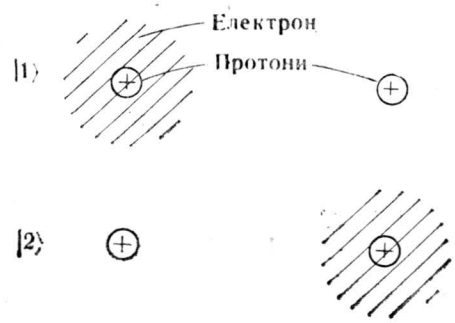
Тук a са комплексни константи, удовлетворяващи равенствата

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1 \qquad (8.5)$$
$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{H_{12}}{E_I - H_{11}};$$
$$|a'_1|^2 + |a'_2|^2 = 1$$
$$\frac{a'_1}{a'_2} = \frac{H_{12}}{E_{II} - H_{22}}. \qquad (8.6)$$

Ако H_{11} и H_{22} са равни помежду си, равни например на E_0, а $H_{12} = H_{21} = -A$, то $E_I = E_0 + A$, $E_{II} = E_0 - A$ и състоянията $|I>$ и $|II>$ се представят особено просто:

$$|I> = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1> - |2>\right], \qquad |II> = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|1> + |2>\right]. \qquad (8.7)$$

Сега искаме да използуваме тези резултати, за да разгледаме ред интересни примери, взети от химията и физиката. Първият пример ще бъде за йона на водородната молекула. Положително йонизираната молекула на водорода се състои от два протона и един електрон, обикалящ около тях. Какви състояния са възможни за такава система, ако разстоянието между протоните е голямо? Отговорът е съвсем ясен: електронът ще се разположи в близост до единия протон и ще образува водороден атом в най-ниско енергетично състояние, а другият протон ще остане като единичен положително зареден йон. Следователно, когато двата протона са отдалечени един от друг, можем нагледно да си представим физическото състояние като такова, при което електронът е „придаден" към единия от протоните. Естествено, съществува и симетричното състояние, при което електронът се намира при другия протон, а йон се оказва първият протон. Тази двойка състояния ще приемем за базисни и ще ги означим с $|1>$ и $|2>$. Те са показани на фиг. 8.1. В действителност електронът, намиращ се около протона, притежава множество състояния, защото той може да съществува в различни възбудени състояния на водородния атом. Но засега няма да се интересуваме от тях и ще разглеждаме само случая, когато атомът на водорода се намира в най-ниското си енергетично състояние, а освен това, за известно време ще пренебрегнем спина на електрона. Ние просто ще предположим[1], че за всички интересуващи ни състояния спинът на електрона е насочен нагоре по оста z.



Фиг. 8.1. Базисните състояния за два протона и един електрон

За да се отнеме електрон от водородния атом, необходима е енергия 13,6 eV. Толкова енергия е необходима — много, според досегашните ни мащаби, за да се окаже електронът по средата между двата протона, така че, според класическите схващания, електронът не може да премине от единия протон към другия. Обаче в квантовата механика такава възможност съществува — макар и неголяма. Съществува някаква малка амплитуда електронът от единия протон да премине към другия. Тогава в първо приближение всяко от нашите базисни състояния $|1>$ и $|2>$ ще имат енергия E_0, равна на сумата на енергията на атома на водорода и на протона. Матричните елементи H_{11} и H_{22} на хамил-

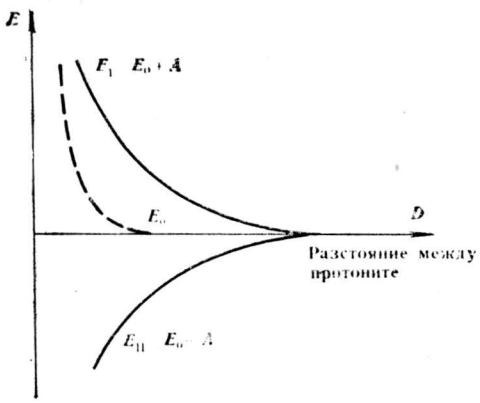
[1] Докато няма силни магнитни полета, това предположение е напълно задоволително. Влиянието на магнитните полета върху електрона ще обсъдим по-късно в тази глава, а слабите спинови ефекти във водородния атом — в гл. 10.

тониана можем да приемем приблизително равни на E_0. Другите матрични елементи H_{12} и H_{21}, представляващи амплитудите на прехода на електрона между двата протона, ще положим равни на $-A$.

Виждате, че това е същата история, която ние познаваме от последните две глави на тази книга. Ако се пренебрегне възможността електронът да преминава от единия към другия протон, двете състояния ще имат напълно еднакви енергии. Обаче тази енергия се разцепва на две енергетични нива поради възможността за преходи на електрона между двата протона и колкото тази вероятност е по-голяма, толкова по-голямо е разцепването. Така енергиите на двете нива са равни съответно на E_0+A и E_0-A и състояния, които притежават такива енергии, се описват с уравнения (8.7).

От решенията на тези уравнения се вижда, че ако протонът и водородният йон са разположени близо един до друг, електронът не ще остава около единия протон, а ще прескача от единия към другия и обратно. Ако първоначално електронът е бил близо до единия протон, след време той ще започне да се колебае между състоянията $|1>$ и $|2>$; това се описва от решения, които се изменят с времето. За да се получат решения, отговарящи на най-ниското енергетично ниво (което не се мени с времето), е необходимо отначало системата да притежава еднаква амплитуда за пребиваване на електрона около всеки от протоните. Впрочем нека пак напомним, електроните не са два; ние съвсем не твърдим, че около всеки от протоните има електрон. Има само *един* електрон и *той* има еднаква амплитуда (по големина $1/\sqrt{2}$) да бъде в двете възможни състояния.

По-нататък. За електрона, който се намира в близост до единия протон, амплитудата A, че той ще се окаже близо до другия протон, зависи от разстоянието между тях. Колкото те са по-близо един до друг, толкова амплитудата е по-голяма. Вие помните, че в гл. 5 говорихме за амплитудата за „проникване“ на електрона през „бариера“, на каквото, според класическите канони той не е способен. Сега положението е същото. Амплитудата за това електронът да премине към другия протон намалява с разстоянието по експоненциален закон (за големи разстояния). Щом като вероятността, а следователно и големината на A расте с приближаване на протоните един към друг, ще расте и разстоянието между енергетичните нива. Ако системата се намира в състояние $|I>$, с намаляване на разстоянието енергията E_0+A ще нараства, така че тези квантовомеханични ефекти ще водят до появяване на *сила на отблъскване*, която се стреми да раздели протоните. Ако пък системата се намира в състояние $|II>$, при сближаване пълната енергия ще *намалява*; съществува *сила на привличане*, притегляща протоните един към друг. Тези енергии се изменят с разстоянието между протоните така, както е показано на фиг. 8.2. Това представлява квантовомеханичното обяснение на силите на свързване, образуващи йона H_2^+.



Фиг. 8.2. Енергиите на двете стационарни състояния на йона H_2^+ във функция на разстоянието между двата протона

Обаче ние забравихме за една подробност. Допълнително към вече описаната сила съществува и силата на взаимно електростатично отблъскване между двата протона. Когато двата протона са отдалечени много един от друг (като на фиг. 8.1), „голият“ протон вижда пред себе си само неутралния атом, така че електростатичната сила може да се пренебрегне. При големи сближения обаче „голият“ протон понякога се оказва „вътре“ в електронния облак, т. е. средно той е по-близо до протона, отколкото до електрона. Появява се добавъчна електростатична енергия, която, разбира се, е положителна. Тази енергия — тя също зависи от разстоянието — трябва да бъде включена в E_0. Значи за E_0 трябва да приемем нещо, което да прилича на пунктирната крива от фиг. 8.2; тази енергия бързо нараства за разстояния, по-малки от радиуса на водородния атом. Енергията на прехода A трябва да се прибави или извади към E_0. При това положение енергиите E_I и E_{II} ще се изменят с междупротонното разстояние D, както е показано на фиг. 8.3. (На фигурата сме показали резултати от

по-подробни пресмятания.) Междупротонното разстояние е дадено в ангстрьоми ($1\text{Å}=10^{-10}\text{m}$), а излишъкът от енергия над протона плюс водородния йон е даден в единици „ридберги“, (13,6 eV.), което представлява енергията на свързване на електрона във водородния атом). Вие виждате, че състоянието $|II>$ има точка с минимална енергия — равновесна конфигурация за йона H_2^+. Енергията в тази точка е по-ниска от енергиите на отделния протон, и на отделния водороден йон, така че системата е свързана. Отделният електрон действува така, че свързва двата протона. Химик би нарекъл това „едноелектронна връзка“.

Този вид химическа връзка често се нарича „квантовомеханичен резонанс“ (по подобие на две свързани махала, за които ние вече говорихме). Но това звучи по-тайнствено, отколкото е в действителност; „резонанс“ имаме само когато още отначало базисните състояния са избрани несполучливо, както беше при нас! А ако за базисни състояния се изберат състоянията $|II>$, веднага ще се получи най-ниското енергетично състояние.

Възможно е и друго обяснение защо енергията на това състояние трябва да бъде по-ниска от енергията на протона плюс енергията на водородния атом. Нека си представим електрона около двата протона, които са отдалечени на определено, но не много голямо разстояние. Вие помните, че електронът по изискванията на принципа на неопределеността е „размазан“ около единичен протон. Електронът „търси“ равновесно положение, опитвайки се да получи по-малка енергия (най-ниската кулонова *потенциална* енергия), като при това да не се окаже много притеснен в пространството, което би довело до по-висока *кинетична* енергия (от съотношението за неопределеност $\Delta p\,.\,\Delta x\sim\hbar$). Ако пък протоните са два, местата, където електронът може да има ниска потенциална енергия, ще бъдат повече. Той може да се „размаже“ (намалявайки кинетичната си енергия), без да повишава при това потенциалната си енергия. В резултат — неговата енергия ще бъде по-ниска от енергията на водородния атом. Тогава защо другото състояние $|I>$ има по-висока енергия? Но забележете, че то се представя от *разликата* между състоянията $|1>$ и $|2>$. Поради симетрията на $|1>$ и $|2>$ разликата между тях трябва да има нулева амплитуда за възможността електронът да се окаже на половината разстояние между протоните. Това означава, че електронът е по-силно ограничен в пространството, което води и до по-голяма енергия.

Налага се да признаем, че нашето приближено разглеждане на йона H_2^+ като система с две енергетични нива напълно пропада, когато протоните се приближат до точката на минимума на кривата на фиг. 8.3; тогава вече не се получават добри стойности за енергията на свързване. На малки разстояния енергията на двете „състояния“ вече не е E_0; става необходимо по-точно квантовомеханично разглеждане.

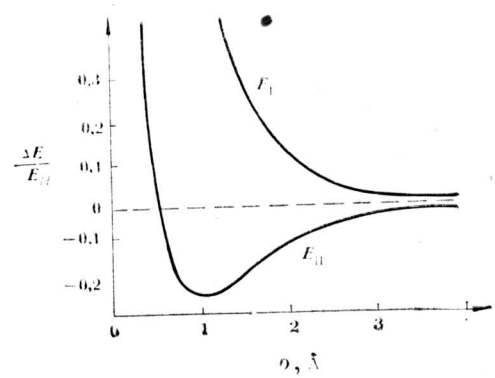
Нека предположим, че сега ни интересува какво ще се случи, ако вместо два протона имахме два различни обекта, например един протон и един положителен литиев йон (при това и двете частици, както и по-рано, имат положителни заряди, равни на единица). В този случай двата члена H_{11} и H_{22} в хамилтониана вече няма да съвпадат; те ще бъдат съвършено различни, ако се окаже, че по абсолютна стойност разликата е много по-голяма от $A=-H_{12}$, силата на привличане ще стане много слаба. В това можем да се убедим по следния начин.

Ако в (8.3) положим $H_{12}H_{21}=A^2$, ще получим

$$E=\frac{H_{11}+H_{22}}{2}\pm\frac{H_{11}-H_{22}}{2}\sqrt{1+\frac{4A^2}{(H_{11}-H_{22})^2}}\,.$$

Когато $H_{11}-H_{22}$ е много по-голямо от A^2, коренът с голяма точност ще бъде равен на

$$1+\frac{2A^2}{(H_{11}-H_{22})^2}\,.$$



Фиг. 8.3. Енергетичните нива на йона H_2^+ е във функция на между протонното разстояние D ($E_H=13{,}6$ eV)

Тогава енергиите ще бъдат

$$E_I = H_{11} + \frac{A^2}{H_{11} - H_{22}},$$

$$E_{II} = H_{22} - \frac{A^2}{H_{11} - H_{22}}. \qquad (8.8)$$

Сега вече те добре съвпадат с енергиите H_{11} и H_{22} на отделните атоми и само с малко се различават поради наличието на амплитудите на преход A.

Разликата в енергиите $(E_I - E_{II})$ е равна на

$$(H_{11} - H_{22}) + \frac{2A^2}{H_{11} - H_{22}}.$$

Добавката към разстоянието между нивата поради преходите на електрона вече не е $2A$; тя съставлява $\frac{A}{(H_{11} - H_{22})}$ части от тази величина (която по предположение е много по-малка от единица). Освен това самата зависимост на $E_I - E_{II}$ от разстоянието между ядрата сега е много по-слаба в сравнение със случая на йона H_2^+: в него влиза също множителят $\frac{A}{H_{11} - H_{22}}$. По такъв начин може да се разбере защо връзката между несиметричните двуатомни молекули е по-слаба.

В така развитата теория на йона на H_2^+ ние разглеждахме механизма, по който намиращият се между два протона електрон създава сила на притегляне между тях, даже и когато те са доста отдалечени един от друг. Силата на притегляне се дължи на намалената енергия на системата, причинена от възможността на електрона да преминава от единия протон към другия. При такива преходи системата преминава от конфигурация на водороден атом — протон към конфигурация протон — водороден атом и обратно. Този процес може да се запише символично така:

$$(H_1 p) \rightleftarrows (p_1 H).$$

Изменението на енергията, предизвикано от такива преходи, е пропорционално на амплитудата A за това, че електрон с енергия $-W_H$ (това е неговата енергия на свързване във водородния атом) може да премине от един протон към друг.

При големи разстояния R между протоните електростатичната потенциална енергия на електрона е близка до нула почти в цялото пространство, което електронът е принуден да преминава при преходите между двата протона. Така че в това пространство електронът се движи почти като свободна частица във вакуум, притежавайки при това *отрицателна* енергия! В гл. 1 (уравнение 1.7) ние видяхме, че амплитудата за това частица с определена енергия да преминава от едно място в друго, отдалечено на разстояние r, е пропорционална на

$$\frac{e^{(i/\hbar)\, pr}}{r},$$

където p е импулсът на частицата, съответстващ на дадената енергия. В разглеждания случай импулсът p се определя от израза (прилага се нерелативистичната формула)

$$\frac{p^2}{2m} = -W_H. \qquad (8.9)$$

А това означава, че p е имагинерно число

$$p = i\sqrt{2m W_H}$$

(другият знак пред корена води до абсурд).

Оказва се, че трябва да се очаква амплитудата A за йона

H_2^+ да се мени като

$$A \sim \frac{e^{-(\sqrt{2mW_H}/\hbar)R}}{R} \tag{8.10}$$

при големи разстояния между протоните. Отместването на енергията, предизвикано от електронната връзка, е пропорционално на A; значи съществува сила, сближаваща двата протона, която при големи R е пропорционална на производната по R от (8.10).

На края за пълнота трябва да отбележим, че при едноелектронна система с два протона съществува още един ефект, който също води до зависимост от R. Досега го пренебрегвахме, понеже обикновено той не е много важен, с изключение на случаите на големи разстояния, при които енергията на обменния член A намалява експоненциално до много малки стойности. Новият ефект, който имаме пред вид, е електростатичното притегляне на протона към атома на водорода, възникващ поради същата причина, поради която всеки зареден предмет притегля към себе си друг незареден. „Голият" протон създава електростатично поле $\mathscr{E}$ (което се изменя като $1/R^2$) около неутралния атом; атомът се поляризира, придобива диполен момент μ, пропорционален на $\mathscr{E}$. Енергията на дипола е $\mu\mathscr{E}$, т. е. тя е пропорционална на $1/R^4$ или $\mathscr{E}^2$. Следователно, в израза за енергията на системата съществува член, който намалява с четвъртата степен на разстоянието (този член представлява поправка към E_0). Тази енергия намалява с разстоянието по-бавно, отколкото отместването A, изразено с формула (8.10). На по-големи разстояния R членът с R^4 става най-важен и определя изменението на енергията с R и затова е единствената сила, която остава да действува. Забележете, че електростатичният член и за двете базисни състояния има един и същ знак (когато силата е на притегляне, енергията е отрицателна) и затова и за двете стационарни състояния неговият знак е един и същ, докато същевременно членът за електронния обмен A за двете стационарни състояния има различни знаци.

8-2. Ядрени сили

Видяхме, че система, състояща се от водороден атом и протон, вследствие обмена на единия електрон притежава енергия на взаимодействие, която на големи разстояния R се изменя както

$$\frac{e^{-\alpha R}}{R}, \tag{8.11}$$

където $\alpha = \sqrt{2mW_H}/\hbar$. (Обикновено се казва, че се извършва обмен на „виртуален" електрон, когато подобно на нашия случай електронът е принуден да прескача през област, където енергията му би се оказала отрицателна. Ако говорим конкретно, „виртуален обмен" означава, че явлението предполага квантовомеханична интерференция между състоянията без обмен и състоянията с обмен.)

А сега сме в правото си да зададем следния въпрос: а може би и силите, действуващи между частици, имат подобен произход? Например какво може да се каже за ядрените сили, действуваща между неутрон и протон или между два протона? Опитвайки се да обясни природата на ядрените сили, Юкава предположил, че силата, действуваща между два нуклона, се предизвиква от сходен обменен ефект, само че в случая виртуалната частица не е електрон, а някаква нова частица, която той нарекъл „мезон". Сега ние отъждествяваме мезоните на Юкава с π-мезоните (или „пиони"), възникващи във високоенергетичните взаимодействия между протони или между други частици.

За пример да разгледаме какъв вид сили възникват от това, че протон и неутрон си обменят положителни пиони (π^+) с маса m_π. Както водородният атом H^0 може да се лиши от електрона си e^- и да се превърне в протон p^+

$$H^0 \rightarrow p^+ + e^-, \tag{8.12}$$

така и протонът p^+ може да премине в неутрон n^0, изпускайки π^+-мезон :

$$p^+ \rightarrow n^0 + \pi^+. \tag{8.13}$$

Следователно ако имаме протон (в точката a) и неутрон (в точката b), разделени на разстояние R, протонът може да се превърне в неутрон, изпускайки π^+-мезон, който след това се поглъща от неутрона в точката b , като го превръща в протон. По такъв начин съществува енергия на взаимодействие на системата от два нуклона и един пион, която зависи от амплитудата A за обмен на пиона, както това беше и с електронния обмен при йона H_2^+.

В процеса (8.12) енергията на атома H^0 (ако тя се изчисли нерелативистично, като се пренебрегне енергията на полето на електрона W_H) е по-малка от енергията на протона с големина, равна на mc^2, така че *кинетичната* енергия на електрона е отрицателна — или импулсът е имагинерна величина [вж. уравнение (8.9)]. В ядрения процес (8.13) масите на протона и неутрона са почти равни, така че *пълната* енергия на π^+-мезона ще се окаже равна на нула. Съотношението между пълната енергия E и импулса p на пиона с маса m_π е

$$E^2 = p^2c^2 + m_\pi^2 c^4.$$

Щом като E е равно на нула (или поне пренебрежимо малко в сравнение с m_π), импулсът отново ще се окаже имагинерен:

$$p = im_\pi c.$$

Повтаряйки познатите ни вече разсъждения, с помощта на които ние изчислихме амплитудата за това, свързан електрон да проникне през потенциалния бариер в пространството между двата протона, ние получаваме за случая на ядрени сили амплитудата A за обмен на пион, която при големи R ще има поведение, както

$$\frac{e^{-(m_\pi c/\hbar)\, R}}{R}. \tag{8.14}$$

Енергията на взаимодействие е пропорционална на A и следователно се изменя по същия начин. По такъв начин получаваме изменението на енергията във формата на т. нар. *потенциал на Юкава* между два нуклона. Впрочем по-рано същата форма получихме от диференциалното уравнение за движение на пиона във вакуум. [вж. гл. 28, т. II, уравнение (28.18)].

Следвайки същите разсъждения, можем да припишем взаимодействието между два протона (или два неутрона) от обмена на неутрален пион π^0. Така основният процес ще бъде

$$p^+ \rightarrow p^+ + \pi^0. \tag{8.15}$$

Протон може да изпусне виртуален π^0, оставайки след това пак протон. Ако протоните са два, то протон №1 може да изпусне виртуален π^0, който след това ще се погълне от протон № 2. В резултат остават два протона. Това вече се различава от случая на йона H_2^+. Тогава H^0 след изпускане на електрон преминава в протон. Сега предполагаме, че протонът може да изпусне π^0, без да изменя вида си. И наистина, такива процеси се наблюдават във високоенергетичните взаимодействия. Процесът е аналогичен на случая, когато електрон изпуска фотон и все пак си остава електрон :

$$e \rightarrow e + \text{фотон}. \tag{8.16}$$

Ние не „виждаме“ фотони в електрона до момента, когато те се изпуснат или след като се погълнат. Този процес не изменя „природата“ на електрона.

Да се върнем сега пак към нашата двойка протони. Между тях съществува взаимодействие поради наличието на амплитудата A — амплитуда за това единият от протоните да изпусне неутрален пион, който прескача до другия пион и се поглъща от него. И сега тази амплитуда е пропорционална на (8.14), като вече m_π е масата на неутралния пион. Сходни разсъждения показват наличието на взаимодействие и между два неутрона. А понеже ядрените сили (при пренебрегване на електричните ефекти), действуващи между неутрон и протон, протон и протон и неутрон и неутрон, са еднакви, достигаме до заключението, че и масите на заредените и неутралния пиони трябва да са равни помежду си. И действително, експериментално се установява, че техните маси са много близки една до друга, а разликата между тях е приблизително такава, каквато следва от поправките за собствената енергия (вж. гл. 28, т. II).

Съществуват и други видове частици, например K-мезони, които могат да бъдат разменяни между нуклоните. Възможна е даже едновременна размяна на два пиона. За всички тези „обменящи се обекти" масата на частицата m_x е по-голяма от масата на пиона m_π, което води до амплитуда на обмен, изменяща се като

$$\frac{e^{-(m_x c/\hbar)R}}{R}.$$

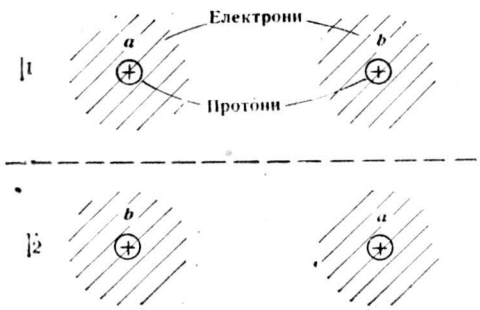
Такава амплитуда затихва по-бързо, отколкото амплитудата при едномезонен обмен. Засега никой не знае как се изчисляват тези амплитуди за частици с големи маси, но за достатъчно високи стойности на R важи пионният обмен. И действително, опитите, при които играе роля само взаимодействието на големи разстояния, показват, че енергията на взаимодействие е именно такава, каквато предсказва теорията на еднопионния обмен.

В класическата теория на електричеството и магнетизма кулоновото електростатично взаимодействие и излъчването на светлина от ускоряващ се електричен заряд са тясно свързани — и двете следват от уравненията на Максуел. Ние видяхме, че в квантовата теория светлината може да се представи като квантови възбуждания на хармонични колебания на класическото електромагнитно поле. От друга страна, квантовата теория може да бъде построена чрез описването на светлината като частици — фотони, подчиняващи се на статистиката на Бозе — Айнщайн. В гл. 2, § 5, подчертахме, че тези две взаимно изключващи се гледни точки винаги водят до едни и същи предсказания. Може ли вторият подход да бъде последователно и докрай развит, така че от него да следват *всички* електромагнитни ефекти? В частност, ако искаме да опишем електромагнитното поле изцяло на езика на бозе-частиците, т. е. фотоните, тогава, на какво се дължи кулоновата сила?

От гледна точка на „частиците" кулоновото взаимодействие между два електрона *се дължи на размяната на виртуални фотони*. Единият от електроните изпуска фотон (както в реакцията 8.16), който преминава към другия електрон и се поглъща от него — и след това същата реакция протича в обратна посока. Енергията на взаимодействие отново се дава от формула от вида 8.14, но сега m_π трябва да се замени с масата на покой на фотона, която е равна на нула. Следователно виртуалната размяна на фотони води към енергия на взаимодействие, която се изменя обратно пропорционално на R (разстоянието между електроните), точно както кулоновата потенциална енергия. В „частичната" (от думата частица) теория на електромагнетизма процесите на размяна на виртуални фотони довеждат до обяснението на всички явления в електростатиката.

8-3. Водородна молекула

Като следващ пример за система с две състояния ще разгледаме неутралната молекула на водорода H_2. Разбира се, тук нещата са по-сложни, защото при нея имаме вече два електрона. Ще започнем пак със случая, когато двата протона са отдалечени достатъчно един от друг. Но сега към тази система трябва да добавим още два електрона. За да можем да ги различаваме по-добре, да ги наречем „електрон a“ и „електрон b“. И сега пак можем да си мислим за две възможни състояния. Едното от тях е: „електронът a“ да бъде размазан около първия протон, а „електронът b“ — около втория протон (фиг. 8.4). Получават се два водородни атома. Да наречем това състояние $|1>$. Но съществува и друга възможност: около първия протон е размазан „електронът b“, а около втория протон — „електронът a“. Това състояние ще означим с $|2>$. Поради симетрията тези две възможности трябва да бъдат енергетично еквивалентни, но както ще видим по-нататък, енергията на системата не е просто сума от енергиите на двата водородни атома.

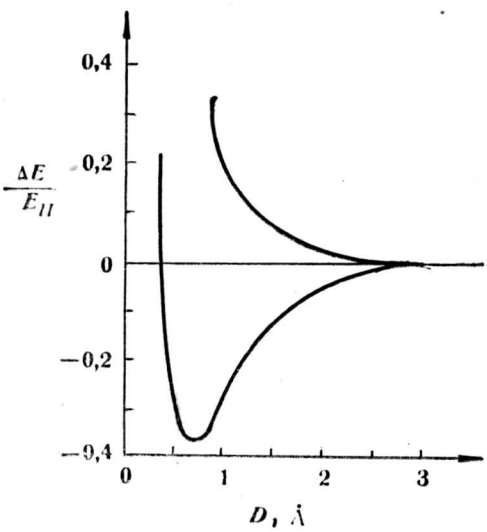


Фиг. 8.4. Базисните състояния на молекулата H_2

Трябва да се отбележи, че съществуват и много други възможности. Например „електронът a“ може да се намира в близост до първия протон, а „електронът b“ пак около *същия* протон, но в друго състояние. Ние не ще разглеждаме такъв случай, понеже енергията на такава система поради кулоновото отблъскване между двата електрона е много по-голяма. За по-голяма точност, би имало смисъл отчитането и на такова състояние; но от разглеждането само на двете основни състояния, показани на фиг. 8.4, ще научим най-важните неща за молекулната връзка. В това приближение можем да описваме всякакви състояния, задавайки амплитудите $<1|\varphi>$ и $>2|\varphi>$. С други думи, векторът на състоянието $|\varphi>$ може да бъде записан като линейна комбинация

$$|\varphi>=\sum_i |i><i|\varphi>.$$

По-нататък, както винаги, ще предположим, че имаме някаква амплитуда A за това, електроните да могат да преминават междупротонното пространство и да разменят местата си. Тази възможност за обмен означава, че енергията на системата, както установихме това и за другите системи с две състояния, е разцепена. Както и за йона на водородната молекула разцепването е много малко, когато разстоянието между протоните е голямо. А когато протоните се приближат един към друг, нараства амплитудата за преходи на електроните и заедно с това и разцепването. Намаляването на енергията на ниското състояние означава, че съществува сила на притегляне, която сближава атомите. И отново, когато атомите се приближат особено много, енергетичните нива се повишават вследствие кулоновото отблъскване. В резултат енергията на двете стационарни състояния ще се изменя с разстоянието, както това е показано на фиг. 8.5. На разстояния от порядъка на 0,74 Å долното енергетично ниво достига минимум; това е и разстоянието между протоните в реалната водородна молекула.



Фиг. 8.5. Енергетичните нива на молекулата H_2 за различни междупротонни разстояния D (E_H = 13,6 eV)

Но може би ще попитате: а какво следва от това, че електроните са тъждествени частици? Ние ги нарекохме „електрон a“ и „електрон b“, но в действителност те са неразличими. Освен това в гл. 2 вече споменахме, че ако поради обмена на електрони (Ферми-частици) съществуват два възможни начина за протичане на някакъв процес, то и двете амплитуди интерферират с *отрицателен* знак. Това означава, че ако разменим „номерата“ на електроните, знакът на амплитудата трябва да се смени. Но току-що достигнахме до извода, че свързаните състояния на водородната молекула трябва да имат вида (при $t=0$)

$$|II>=\frac{1}{\sqrt{2}}\,(|1>+|2>).$$

А според правилата, изработени в гл. 2, такова състояние е недопустимо. Ако се разменят номерата на електроните, ще получим състоянието

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\,(|2>+|1>)$$

и сега знакът ще бъде същият, както по-горе, а не обратен.

Тези разсъждения са верни само когато *спиновете на електроните са еднакви*. Ако и двата спина са насочени нагоре (или надолу), единственото допустимо състояние ще бъде

$$|I>=\frac{1}{\sqrt{2}}\,(|1>-|2>).$$

Сега вече разменянето на местата на електроните ще даде състоянието

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\,(|2>-|1>),$$

което е равно на $-|I>$. Значи, ако доближим два водородни атома с еднакви посоки на техните спинове (т. е. електроните им се въртят в една и съща посока), такива атоми могат да преминат само в състояние $|I>$, а не в $|II>$. Но забележете, че състояние $|I>$ е *горното* енергетично състояние. За него зависимостта „енергия — разстояние“ няма минимум. Два подобни водородни атома винаги ще се отблъскват и няма да образуват молекула. Достигаме до заключението, че не може да съществува водородна молекула, в която електроните са с еднакво насочени спинове. И това наистина е така.

От друга страна, състояние $|II>$ е напълно симетрично относно двата електрона. Наистина, ако преименуваме електроните, наричайки първия b, а втория a, ние отново ще получим същото състояние. В гл. 2, § 7 видяхме, че ако ферми-частици се намират в едно и също състояние, спиновете им *трябва* да бъдат противоположно насочени. Следователно, при свързаната водородна молекула спинът на единия електрон трябва да бъде насочен надолу, а спинът на другия — нагоре.

Целият този разказ за молекулата на водорода ще стане още по-объркан, ако пожелаем да включим в него и спиновете на протоните. Тогава вече не можем да считаме молекулата на водорода за система с *две* състояния. Сега тя е система с *осем* възможни състояния — за всяко от състоянията $|1>$ и $|2>$ са възможни по четири различни пермутации на спиновете, така че пренебрегвайки спиновете на протоните, ние малко опростяваме нещата, но нашите крайни изводи все пак си остават верни.

Ние установихме, че в най-ниското енергетично състояние на молекулата на H_2 спиновете на двата електрона са противоположно насочени. По такъв начин общият спинов момент на количеството на движение на електроните е равен на нула. Обратно, два близко разположени един до друг водородни атома с успоредни спинове (и следователно с общ момент на количеството на движение, равен на $\hbar$) ще се намират в най-горното (несвързано) енергетично състояние; атомите ще се отблъскват. Налице е интересна корелация между посоките на спиновете и енергиите. Това още веднаж илюстрира казаното по-рано: като че ли съществува енергия на „взаимодействие“ между спиновете, защото система с успоредни спинове притежава по-голяма енергия, отколкото система с противоположно насочени спинове. В известен смисъл може да се каже, че спиновете се стремят да се наредят антипаралелно и при това освобождават енергия не поради увеличаване на магнитната сила, а поради принципа на забраната.

В § 1 видяхме, че връзката между два *различни* йона посредством *един* електрон най-често се оказва много слаба. При *двуелектронната* връзка обаче това *не е така*. Нека си представим, че двата протона на фиг. 8.4 са заменени с някаква двойка йони (със затворени вътрешни електронни облаци и единичен йонен заряд) и че енергията на свързване на електроните в двата йона

е различна. Енергиите на състоянията $|1>$ и $|2>$, както и по-рано, ще бъдат равни помежду си, защото във всяко от тези състояния имаме по един електрон за всеки йон. И затова винаги ще се получава разцепване, пропорционално на A. Двуелектронната връзка наистина е преобладаваща — това е обикновената валентна връзка. Химическата връзка като правило предполага тази игра на „прескачане“ напред-назад, в която участвуват два електрона. Макар и да е възможно два атома да са свързани само с един електрон, това в действителност се случва много рядко, тъй като изисква специални условия.

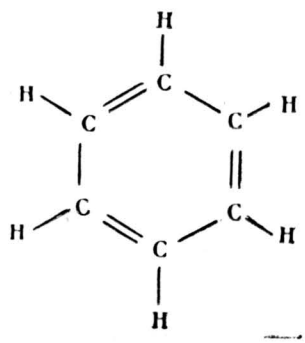
Накрая трябва да отбележим, че ако енергията на привличане на електрона към едното ядро е по-голяма, отколкото към другото ядро, то вече не могат да се игнорират другите мислими състояния. Нека ядрото a (това може да бъде и положителен йон) да привлича електрона по-силно, отколкото ядрото b. Това привличане може да компенсира взаимното отблъскване между двата електрона. И ако това не е така, ниското енергетично състояние може да притежава по-голяма амплитуда за това, двата електрона да се окажат около a (образувайки отрицателен йон) и малка амплитуда за това, поне единият от електроните да се окаже около b. Състоянието ще изглежда като отрицателен йон заедно с положителен йон. Именно това е „йонната“ връзка, каквато например, се реализира в молекулата на NaCl. Виждате, че са възможни всякакви градации между ковалентната и йонната връзка.

Надяваме се, че сега ви е ясно колко много химически факти се обясняват и описват на квантовомеханичен език.

8-4. Молекула на бензола

За изобразяване на сложни органични молекули химиците са изобретили изящни диаграми. Сега искаме да поговорим за една от най-интересните молекули — тази на бензола, чиято диаграма е показана на фиг. 8.6. В нея участвуват напълно симетрично разположени въглеродни и водородни атоми. Всяка чертичка на диаграмата представлява двойка електрони с противоположни спинове, участвуващи в танца на ковалентната връзка. Всеки водороден атом участвува в играта с по един електрон, а всеки въглероден — с по четири; по такъв начин се образува система с 30 електрона. (Във въглеродния атом близо до ядрото има още два електрона, образуващи първата или както се нарича още K-орбита. Те не са показани на диаграмата, понеже са така силно свързани с ядрото, че не играят никаква роля в образуването на ковалентната връзка.) И така, всяка чертичка на диаграмата представлява връзка, т. е. двойка електрони, а двойните връзки означават, че между съответните атоми има по две двойки електрони.

С молекулата на бензола е свързана една загадка. Може да се пресметне каква енергия е необходима за образуването на това химическо съединение, защото химиците са измерили енергията на различните части, образуващи пръстена; например, изучавайки молекулата на етилена, те са разбрали колко е енергията на двойната връзка и т. н. Затова можем да пресметнем пълната енергия, която би трябвало да притежава молекулата на бензола. В действителност, истинската енергия на бензоловия пръстен е много по-малка, отколкото се получава при такова пресмятане: оказва се, че пръстенът е свързан много по-здраво, отколкото това се полага на обикновената система на „ненаситени двойни връзки“. Като правило, система от двойни връзки, която не образува подобен пръстен, е лесно податлива на химически атаки: нейната енергия е сравнително висока и добавяйки нови водородни атоми' двойните връзки лесно се разкъсват. Но при бензола не е така — неговият пръстен е почти неразрушим, т. е. енергията на бензола е много по-ниска, отколкото се получава от пресмятанията, направени по системата на ненаситените двойни връзки.



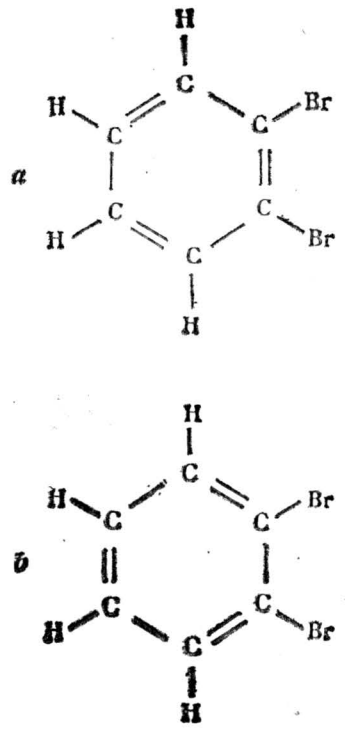
Фиг. 8.6. Молекулата на бензола C_6H_6

Има още една загадка. Нека заменим два съседни водородни атома с атоми на бром, образувайки по този начин *орто-дибромбензол*. Това може да се постигне по два начина. Атомите на брома могат да бъдат на противоположните краища на двойната връзка (фиг. 8.7, *а*) или могат да бъдат на противоположните краища на единичната връзка (фиг. 8.7, *б*). По такъв начин може да се допусне, че е възможно образуването на две различни форми на *орто*-дибромбензола, но в действителност това не е така. Съществува само едно подобно вещество[1].

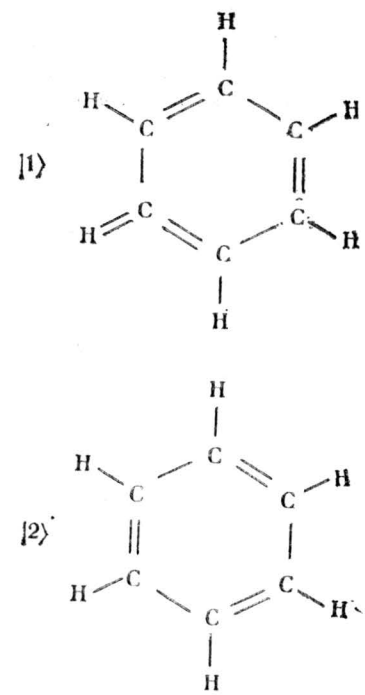
Сега искаме да разрешим тази загадка и може би вие вече се досещате как: разбира се, работата е в това, че „основното състояние" на бензоловия пръстен в действителност е система с две състояния. Лесно може да си представите, че връзките в бензола могат да бъдат разположени по два различни начина, както това е показано на фиг. 8.8. Но вие ще кажете: „Но нали това е едно и също; тяхната енергия трябва да бъде еднаква". Разбира се, че е така. И точно поради това тя трябва да се разглежда като система с две състояния. Всяко състояние представлява една конфигурация на съвкупността от електрони и затова съществува някаква амплитуда A за това, цялата тази плетеница да премине от едно разположение към друго, съществува някаква вероятност електроните да сменят местата си в този кадрил.

Както видяхме, тази вероятност за прехвърляне води към смесено състояние, енергията на което е по-ниска, отколкото би се получило, ако пресмятахме всяка от показаните на фиг. 8.8 схеми поотделно. Вместо това, съществуват две стационарни състояния: едното е с по-висока, а другото — с по-ниска енергия в сравнение с очакваната стойност. Така че в действителност истинското, нормално състояние на бензола (с най-ниска енергия) не е някое от възможните, показани на фиг. 8.8 състояния, а притежава амплитуда $1/\sqrt{2}$ за пребиваване във всяко от тях. Това е единственото състояние на бензола, което следва да се вземе под внимание при пресмятанията в химията на бензола при нормални температури. Впрочем съществува и по-високоенергетичното състояние; ние можем да твърдим това поради силното поглъщане на светлина от бензола в ултравиолетовата област с честота $\omega = \frac{(E_I - E_{II})}{\hbar}$. Спомнете си, че при амонячната молекула, където прескачащ нагоре-надолу обект е тройката протони, разстоянието между енергиите попадаше в микровълновата област. При бензола такива обекти се явяват електроните и тъй като те са много по-леки, то и преходите са много по-полезни, поради което и коефициентът A става голям. В резултат, разликата в енергиите е доста голяма — около 1,5 eV, а това е енергията на ултравиолетов фотон.[2]

Какво става, когато в бензоловата молекула поставим бромни атоми? Тогава пак възниква възможност за две различни елек-



Фиг. 8.7. Двете възможности за орто дибромбензола. Двата атома на брома могат да бъдат разделени от единична или двойна връзка



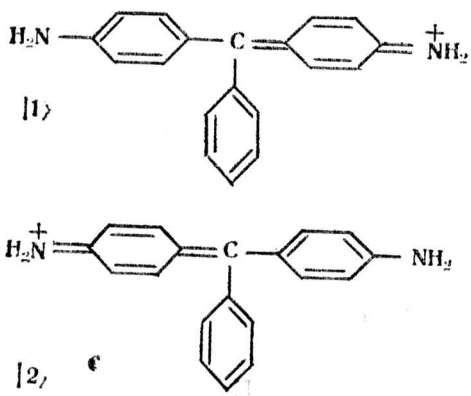
Фиг. 8.8. Базисните състояния на молекулата на бензола

[1] Ние малко опростяваме нещата. Отначало химиците мислеха, че трябва да съществуват *четири* форми на дибромбензола; две форми с бромови атоми при съседни въглеродни атоми (*орто*-дибромбензол), трета форма с атоми на брома при несъседни въглеродни атоми (*мета*-дибромбензол) и четвърта форма с бромови атоми, разположени при срещуположни въглеродни атоми (*пара*-дибромбензол). Но са открили само три форми — *орто*-молекулата съществува само в *една* форма.

[2] Казаното дотук може лесно да доведе до заблуждение. Поглъщането на ултравиолетова светлина от приетата от нас за бензола система с две състояния, би било много слабо, понеже матричният елемент на диполния момент между тези две състояния е нула. (И двете състояния са електрично симетрични и във формулата (7.55) за вероятността на прехода диполният момент μ е равен на нула и затова не се поглъща светлина.) Ако не съществуваха други състояния, наличието на горното енергетично състояние трябваше да доказваме по други пътища. Обаче по-пълната теория на бензола, която тръгва от поголям брой базисни състояния (притежаващи например съседни двойни връзки) показва, че истинските стационарни състояния на бензола са леко отместени в сравнение с изчислените от нас. В резултат все пак възниква диполен момент, благодарение на който се разрешават споменатите по-горе преходи, водещи до поглъщане на ултравиолетова светлина.

тронни конфигурации, показани на фиг. 8.7. Разликата между тях е в това, че двете базисни състояния, от които тръгваме сега, притежават малко различаващи се енергии. В стационарното състояние с по-ниска енергия, както и преди, ще участвуват като линейна комбинация двете състояния, но вече с неравни амплитуди. За състояние $|1\rangle$ амплитудата може да бъде равна, да речем, на $\sqrt{\frac{2}{3}}$, тогава за състояние $|2\rangle$ тя ще бъде равна на $\sqrt{\frac{1}{3}}$. За да се знаят точно коефициентите, е необходима допълнителна информация, но във всеки случай, ако енергиите H_{11} и H_{22} не са равни помежду си, то и амплитудите C_1 и C_2 няма да са равни помежду си. Естествено, това означава, че едната от двете изобразени на рисунката възможности е по-вероятна в сравнение с другата, но все пак, електроните не са достатъчно подвижни и затова едната и другата конфигурация имат някаква крайна амплитуда. За другото стационарно състояние амплитудите са други (например $\sqrt{\frac{1}{3}}$ и $\sqrt{\frac{2}{3}}$), но тя е на по-високо енергетично ниво. Съществува само едно най-ниско енергетично състояние, а не две, както би могло да се очаква въз основа на наивната теория на закрепените химически връзки.

8-5. Багрила



Фиг. 8.9. Двойката базисни състояния на молекулата на фуксина

Да разгледаме още един пример за явления, свързани с две състояния, но този път с големи молекули. Става дума за теорията на багрилата. Много от багрилата, а по-точно повечето изкуствени багрила, притежават една обща характеристика — те притежават своего рода симетрия. На фиг. 8.9 е показан йонът на едно багрило — фуксин (който дава пурпурен цвят). В молекулата му има три пръстеновидни структури, две от които — бензолни пръстени. Третият не съвпада съвсем с бензолния пръстен, защото е само с две двойни връзки. На рисунката са показани две еднакво подходящи схеми и не е трудно да се досетим, че техните енергии трябва да са равни. Но съществува още и амплитуда всички електрони да прескочат от едно състояние в друго, преместваики мястото на „незапълнения“ пръстен на другия край. Когато електроните са много, амплитудата за преход е по-малка в сравнение с тази при бензола и разликата в енергиите на двев стационарни състояния не е толкова голяма. Но въпреки всичкте съществува обикновената двойка стационарни състояния $|\mathrm{I}\rangle$ о, $|\mathrm{II}\rangle$, представляващи сума и разлика на двете базисни състоянияи показани на рисунката. Енергетичната разлика между $|\mathrm{I}\rangle$ и $|\mathrm{II}\rangle$, се оказва равна на енергията на фотон от оптичната област. Ако молекулата се освети, тя поглъща силно при някоя честота и молекулата изглежда ярко осветена. Ето защо тя е багрило!

Друга интересна особеност на такава молекула е, че в двете базисни състояния центровете на електричния заряд са разположени на различни места. В резултат молекулата се влияе силно от действието на външно електрично поле. Подобен ефект наблюдавахме в молекулата на амоняка. Ясно е, че и тук може да се употреби същата математика, стига да са известни числата F_0 и A. Изобщо, те се получават чрез натрупване на експериментален материал. Ако се проведат измервания върху много багрила, често може да се отгатне какво може да се случи с друга подобна молекула. Поради силното отместване на центъра на електричния заряд, стойността на μ във формула (7.55) е голяма и съществува голяма вероятност веществото да погълне светлина с характерна честота $\frac{2A}{h}$. Следователно веществото не е само оцветено, а е много наситено — малко количество вещество поглъща много светлина.

Скоростите на преходите (а с това и на A) са много чувствителни към цялата структура на молекулата. Ако се измени A,

изменя се и разцепването на енергията а заедно с това и цветът на багрилото. Освен това молекулите не са длъжни да бъдат съвършено симетрични. Видяхме, че същото основно явление става и при неголеми видоизменения — даже когато съществува известна асиметрия. Малко изменение на цвета може да се получи чрез въвеждане на малки асиметрии в молекулата на багрилото. Така например, едно друго важно багрило, малахитовото зелено, много прилича на фуксина, но в него две от водородните молекули са заменени с CH_3. Цветът се оказва друг, защото A е променено и скоростта на преходите на електроните е друга.

8-6. Хамилтониан на частици със спин 1/2 в магнитно поле

Да разгледаме още една система с две състояния. Но този път наш обект ще бъде частица със спин 1/2. Някои от нещата, които искаме да кажем, вече бяха засегнати в предишните глави, но повторението може да ви помогне за разбиране на някои неясни места. Можем да считаме, че електронът в покой представлява система с две състояния. Макар че в тази глава ще говорим за „електрони", всички изводи, до които ще достигнем, ще бъдат верни за всички частици със спин 1/2.

Да предположим, че за базисни състояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$ сме избрали състоянията, в които z-компонентата на спина на електрона е равна на $\frac{\hbar}{2}$ или $-\frac{\hbar}{2}$. Това са състоянията $(+)$ и $(-)$, с които се срещахме в предишните глави. За съгласуване на означенията спиновите състояния $|1\rangle$ ще означаваме с „плюс", а спиновите състояния $|2\rangle$ с „минус", като „плюс" и „минус" се отнасят до момента на количество на движение в посоката z.

Всяко мислимо състояние $|\psi\rangle$ на електрона може да се опише с уравнение (8.1), задавайки амплитудите C_1 за възможността електронът да се намира в състояние $|1\rangle$, и амплитудата C_2 — за това той да се намира в състояние $|2\rangle$. За целта ще ни е необходим хамилтонианът на системата с две състояния — електрон в магнитно поле. Да започнем с частния случай на магнитно поле в посоката z.

Нека векторът B да има само z-компонента: B_z. От определението за двете базисни състояния (че техните спинове са паралелни и антипаралелни на B), знаем, че те са също стационарни състояния — състояния с определена енергия в магнитно поле Състояние $|1\rangle$ съответствува на енергия[1], равна на $-\mu B_z$, а състояние $|2\rangle$ — на енергия $+\mu B_z$. В този случай хамилтонианът трябва да бъде много прост, понеже C_1 не влияе на C_2 и обратно:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{dC_1}{dt} &= E_1C_1 = -\mu B_zC_1, \\ i\hbar\frac{dC_2}{dt} &= E_2C_2 = +\mu B_zC_2. \end{aligned} \tag{8.17}$$

В този частен случай хамилтонианът е равен на

$$\begin{aligned} H_{11} &= -\mu B_z, & H_{12} &= 0, \\ H_{21} &= 0, & H_{22} &= +\mu B_z. \end{aligned} \tag{8.18}$$

Така ние знаем какъв вид има хамилтонианът, когато магнитното поле е насочено по оста z; знаем също и енергиите на тези стационарни състояния.

А сега да разгледаме случая, когато магнитното поле не е насочено по z. Какъв е сега хамилтонианът? Как се менят матрич-

[1] Приемаме енергията на покой m_0C^2 за „нула" на енергетичната скала и считаме магнитния момент μ на електрона за отрицателно число, понеже той е насочен против спина.

ните елементи, когато полето не е по оста z? Ще предположим, че за членовете на хамилтониана е в сила нещо като принцип на суперпозиция. По-точно ще предположим, че ако две магнитни полета се наслагват, то и членовете на хамилтониана се сумират: ако е известно H_{ij} за поле, състоящо се само от една компонента, например B_z, ще бъде известно и H_{ij} за поле само с компонента B_x, а H_{ij} за поле с компоненти B_z и B_x ще се получи от събирането на хамилтонианите. Това е безспорно вярно, ако се разглеждат само полета в посока z: ако се удвои B_z, удвояват се и всички H_{ij}. И така, да допуснем, че H е линейно спрямо полето **B**. За да намерим H_{ij} за какво да е магнитно поле, не е необходимо нищо повече.

Нека имаме постоянното поле **B**. Ако прекараме оста z по посока на полето, *бихме забелязали* две стационарни състояния с енергии $\pm\mu B$. Изборът на друга посока на осите не би изменило физичната ситуация. *Описанието* на стационарните състояния би станало друго, но тяхната енергия, както и преди, би била $\pm\mu B$, т. е.

$$E_I = -\mu\sqrt{B_x^2+B_y^2+B_z^2}$$

и (8.19)

$$E_{II} = +\mu\sqrt{B_x^2+B_y^2+B_z^2}.$$

По-нататък вече всичко е съвсем лесно. Ние имаме формулите за енергията. Необходим ни е хамилтониан, линеен относно B_x, B_y и B_z, който да даде именно такива енергии, когато приложим общата формула (8.3). Сега задачата е да намерим хамилтониана. Нека преди всичко отбележим, че енергията се разцепва симетрично и че нейната средна стойност е нула. Като погледнем (8.3), веднага ще видим, че това изисква

$$H_{22} = -H_{11}\,.$$

(Забележете, че това се потвърждава от всичко, което вече знаем при $B_x = B_y = 0$; в този случай $H_{11} = -\mu B_z$ и $H_{22} = \mu B_z$.) Ако приравним енергиите от (8.3) на известното от (8.19.), ще получим

$$\left(\frac{H_{11}-H_{22}}{2}\right)^2 + |H_{12}|^2 = \mu^2(B_x^2+B_y^2+B_z^2). \tag{8.20}$$

(Ние използувахме също и факта, че $H_{21} = H_{12}^*$, така че $H_{12}H_{21}$ може да бъде записано във вида $|H_{12}|^2$.) Пак в частния случай на поле в посоката z ще имаме

$$\mu^2 B_z^2 + |H_{12}|^2 = \mu^2 B_z^2,$$

откъдето $|H_{12}|$ е равно на нула, което означава, че в H_{12} не може да участвува член с B_z. (Вие помните какво говорихме за линейността на членовете относно B_x, B_y и B_z.)

И така, засега узнахме, че в H_{11} и H_{22} влизат членове с B_z, а в H_{12} и H_{21} — не. Може да се опитаме да отгатнем формулите, които удовлетворяват (8.20), като напишем:

$$H_{11} = -\mu B_z\,,\quad H_{22} = \mu B_z\,,$$

и

$$|H_{12}|^2 = \mu^2\,(B_x^2+B_y^2). \tag{8.21}$$

Оказва се, че това не може да се постигне по *никакъв друг начин!*

„Почакайте, — ще кажете вие, — H_{12} не е линейно относно B. От (8.21) следва, че $H_{12} = \mu\sqrt{B_x^2+B_y^2}$." Не е задължително. Има и друга възможност, която вече е *линейна*, а именно

$$H_{12} = \mu(B_x + iB_y).$$

Всъщност, тези възможности не са единствени, а в общия случай може да се напише

$$H_{12} = \mu\,(B_x \pm iB_y)\,e^{i\delta},$$

където δ е произволна фаза.

Какъв знак и каква фаза трябва да вземем? Оказва се, че можем да вземем какъвто си искаме знак и каквато си искаме фаза и от това няма да се изменят физическите резултати. Така че изборът им е въпрос на споразумение. Още преди нас някой е решил да поставя знак минус и да вземе $e^{i\delta}=-1$. Можем да направим същото и да напишем

$$H_{12}=-\mu\,(B_x-iB_y),$$
$$H_{21}=-\mu\,(B_x+iB_y).$$

(Впрочем, това се съгласува с избора на фазата, което ние направихме в гл. 4.)

Пълният хамилтониан за електрон в произволно магнитно поле следователно ще бъде равен

$$H_{11}=-\mu B_z,\quad H_{12}=-\mu\,(B_x-iB_y),$$
$$H_{21}=-\mu\,(B_x+iB_y),\quad H_{22}=+\mu B_z. \tag{8.22}$$

А уравненията за амплитудите C_1 и C_2 ще бъдат:

$$i\hbar\frac{dC_1}{dt}=-\mu\,[B_zC_1+(B_x-iB_z)\,C_2],$$

$$i\hbar\frac{dC_2}{dt}=-\mu[(B_x+iB_y)\,C_1-B_zC_2]. \tag{8.23}$$

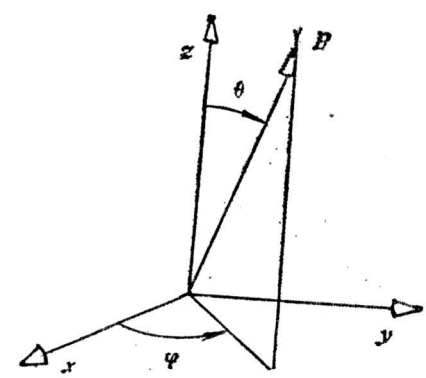
И така, открихме „уравненията на движение на спиновите състояния“ на електрон в магнитно поле. Ние ги отгатнахме, използувайки някои физични аргументи, но истинската проверка на всеки хамилтониан се състои в това, че той трябва да дава предсказания, съвпадащи с експеримента. От всички направени досега проверки следва, че тези уравнения са правилни. Нещо повече — всички наши разсъждения се отнасяха за постоянно поле, но написаният хамилтониан е правилен и тогава, когато полето се мени с времето. Следователно, сега можем да приложим уравнения (8.23) за решаването на всевъзможни задачи.

8-7. Въртящ се електрон в магнитно поле

Първи пример: нека имаме постоянно поле в посока z. На него съответствуват две стационарни състояния с енергии $\pm\mu B_z$. Да добавим слабо поле в посоката x. Тогава уравненията се получават същите, както в разглежданата вече задача за двете състояния. Пак за кой ли път вече се получава познатото ни прехвърляне, като енергетичните нива се разцепват слабо. Нека сега x-компонентата на полето започне да се изменя с времето, да кажем както $\cos\omega t$. Тогава уравненията ще станат подобни на тези за амонячната молекула в трептящо електрично поле (вж. гл. 7). И по същия начин вие можете да опишете процеса във всичките му подробности. При това ще видите, че трептящото поле води към преходи от $+z$-състояние към $-z$-състояние и обратно, стига хоризонталната компонента на полето да трепти с честота, близка до резонансната $\omega_0=2\mu\frac{B_z}{\hbar}$. *Това води към квантово-механичната теория на явлението магнитен резонанс, описан в гл. 35, т. II.*

Може да се построи и мазер, в който да се използува система със спин 1/2. Приборът на Щерн-Герлах създава сноп от частици, поляризирани, да кажем, в посоката $+z$, и след това те се отправят към резонансна кухина, намираща се в постоянно магнитно поле. Трептящото поле в кухината, взаимодействувайки с магнитния момент, предизвиква преходи, които доставят енергия на кухината.

Сега да разгледаме втори пример. Нека имаме магнитно поле **B** с посока, характеризираща се с полярни ъгли θ и φ (фиг. 8.10). Да допуснем още, че имаме електрон, чийто спин е насочен по посоката на полето. Тогава на какво са равни амплитудите C_1 и



Фиг. 8.10. Посоката **B** се определя от полярния ъгъл θ и азимуталния ъгъл φ

C_2 за тези електрони? С други думи, означавайки състоянието на електрона с $|\varphi>$ искаме да напишем

$$|\psi>=|1>C_1+|2>C_2,$$

където C_1 и C_2 са равни

$$C_1=<1|\psi>,\ C_2=<2|\psi>,$$

а $|1>$ и $|2>$ означават, както и по-рано, състоянията $|+>$ и $|->$ (спрямо избраната от нас ос z).

Отговорът на този въпрос се съдържа в нашите общи уравнения за система с две състояния. Първо, знаем, че щом спинът на електрона е паралелен на **B**, той се намира в стационарно състояние с енергия $E_I=-\mu B$. Затова C_1 и C_2 трябва да се изменят както $e^{-iE_I t/\hbar}$ [вж. уравнение (7.18)]; техните коефициенти се дават от връзката (8.5):

$$\frac{a_1}{a_2}=\frac{H_{12}}{E_I-H_{II}}. \tag{8.24}$$

Освен това, a_1 и a_2 трябва да се нормират така, че да имаме $|a_1|^2+|a_2|^2=1$ Стойностите на H_{11} и H_{12} трябва да вземем от (8.22), използувайки равенствата

$$B_z=B\cos\theta,\ B_x=B\sin\theta\cos\varphi,\ B_y=B\sin\theta\sin\varphi.$$

Тогава ще имаме

$$H_{11}=-\mu B\cos\theta,$$

$$H_{12}=-\mu B\sin\theta\ (\cos\varphi-i\sin\varphi). \tag{8.25}$$

Впрочем, скобката във второто уравнение е просто $e^{-i\varphi}$, така че по-добре да напишем

$$H_{12}=-\mu B\sin\theta e^{-i\varphi}. \tag{8.26}$$

Поставяйки тези матрични елементи в (8.24) и като съкратим на $-\mu B$, получаваме

$$\frac{a_1}{a_2}=\frac{\sin\theta e^{-i\varphi}}{1-\cos\theta}. \tag{8.27}$$

Знаейки тези отношения и условието за нормировка, може да се определят и a_1 и a_2. Да се направи това не е трудно, но ние ще съкратим процедурите, като приложим един трик. Известно е, че $1-\cos\theta=2\sin^2\frac{\theta}{2}$ и че $\sin\theta=2\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$.

Следователно, (8.27) съвпада с

$$\frac{a_1}{a_2}=\frac{\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)e^{-i\varphi}}{\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)}. \tag{8.28}$$

Така че един от възможните отговори е

$$a_1=\cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi},\quad a_2=\sin\frac{\theta}{2}. \tag{8.29}$$

Това удовлетворява и уравнение (8.28) и условието

$$|a_1|^2+|a_1|^2=1.$$

Вие знаете, че умножаването на a_1 и a_2 с произволен фазов множител не изменя с нищо нещата. Обикновено се придава по-симетричен вид на формулите (8.29), като се умножават с $e^{i\varphi/2}$. Прието е те да се записват така:

$$a_1=\cos\frac{\theta}{2}e^{-\frac{i\varphi}{2}},\quad a_2=\sin\frac{\theta}{2}e^{+\frac{i\varphi}{2}}. \tag{8.30}$$

Това представлява и отговорът на поставения проблем. Числата a_1 и a_2 са амплитудите за това, електронът да бъде забелязан със спин, насочен нагоре или надолу (спрямо оста z), ако е известно, че неговият спин е бил насочен по оста (θ, φ). (Амплитудите C_1 и C_2 са равни на a_1 и a_2, умножени по $e^{-iE_I t/\hbar}$.)

Сега обърнете внимание на следното. Интензитетът B на магнитното поле не се появява никъде в (8.30). Очевидно, същият резултат се получава при граничен преход $B \to 0$. Това означава, че получихме *общ* отговор на въпроса как да представим частици със спин, насочен по посока на произволна ос. Амплитудите (8.30) — това са проекционните амплитуди за частици със спин 1/2, подобни на проекционните амплитуди за частици със спин 1, получени в гл. 3 [уравнение (3.38)]. Сега вече можем да намерим амплитудите за преминаване през различни филтри на Щерн-Герлах на филтрирани снопове от частици със спин 1/2.

Нека $|+>$ да представя състояние със спин, насочен нагоре по оста z, а $|-z>$ — състояние със спин, насочен надолу. Ако $|+z'>$ представя състояние със спин, насочен нагоре по оста z' и свързващ с нея ъглите θ и φ, по използуваните в гл. 3 означения ще имаме

$$<+z|+z'> = \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2}, \quad <-z|+z'> = \sin\frac{\theta}{2} e^{+i\varphi/2}. \qquad (8.31)$$

Тези резултати са еквивалентни на формулите, получени вече по геометричен път в гл. 4 [вж. уравнение (4.36)]. (Ако на времето сте решили да пропуснете 4 гл., ето ви още един съществен резултат от нея.)

И накрая нека още веднаж се върнем към примера, който вече неведнаж сме разглеждали. Отначало имаме електрон с определена посока на спина, после включваме за известно време (например за 25 минути) магнитно поле с посока по z, а след това го изключваме. Какво ще бъде крайното състояние на електрона? Нека пак представим състоянието му като линейна комбинация $|\psi> = |1> C_1 + |2> C_2$. Но в нашата задача състоянията с определена енергия са двете базисни състояния $|1>$ и $|2>$. Така че C_1 и C_2 се изменят само по фаза. Знаем, че

$$C_1(t) = C_1(0) e^{-iE_I t/\hbar} = C_1(0) e^{+i\mu Bt/\hbar},$$

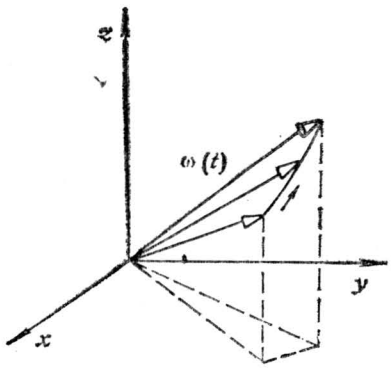
$$C_2(t) = C_2(0) e^{-iE_{II} t/\hbar} = C_2(0) e^{-i\mu Bt/\hbar}.$$

Вече казахме, че отначало спинът на електрона има определена посока. Това означава, че C_1 и C_2 са били две числа, определени от формули (8.30). След T секунди можем да получим новите C_1 и C_2, като ги умножим съответно на $e^{i\mu B_z T/\hbar}$ и $e^{-i\mu B_z T/\hbar}$. Какво представляват тези състояния? Лесно е да се съобрази, че това е равносилно на изменение на ъгъл φ, изваждайки от него $2\mu B_z T/\hbar$, без при това да се изменя ъгълът θ. Това означава, че в края на интервала от време, когато е било включено магнитното поле, състоянието ще представлява електрон със спин в посока, отличаваща се от първоначалната само със *завъртане* около оста z на ъгъл $\Delta\varphi = 2\mu B_z T/\hbar$. Понеже този ъгъл е пропорционален на T, може да се каже, че посоката на спина ще прецесира около оста z със скорост $2\mu B_z/\hbar$. Този резултат вече получихме и по-рано, но не така строго. Сега имаме пълното и точно квантовомеханично описание на атомните магнити.

Любопитно е, че математическите идеи, които току-що приложихме за въртящ се електрон в магнитно поле, са приложими и за всяка система с две състояния. Това означава, че като правим математическа аналогия с въртящ се електрон, с помощта на чисто геометрични разсъждения могат да се решават всякакви задачи, отнасящи се до системи с две енергетични нива. Отначало отместваме енергията, така че $(H_{11} + H_{22})$ да бъде равно на нула (т. е. $H_{11} = -H_{22}$). И тогава всяка задача за подобна система

формално съвпада със задачата за електрон в магнитно поле. Необходимо е само да *отъждествите* $-\mu B_z$ с H_{11}, а $-\mu(B_x - iB_y)$ с H_{12}. Няма значение с какво имате работа — амонячна молекула или нещо друго — вие можете да преведете всичко на езика на електрона. По такъв начин, ако сме в състояние да решаваме задачата за електрона в *общия случай*, можем да решаваме *всички* задачи за системи с две състояния.

А общото решение за електрона вече имаме. Нека отначало електронът да притежава определено състояние, в което спинът му да е насочен нагоре по някаква посока, а магнитното поле **B** — в друга посока. Въртете посоката на спина около оста **B** с *векторна* ъглова скорост $\vec{\omega}(t)$, равна на някаква константа, умножена по вектора **B** (а именно $\vec{\omega} = 2\mu\mathbf{B}/\hbar$). Ако **B** се мени с времето, движете както и по-рано оста на въртене така, че тя да остава успоредна на **B** и изменяйте скоростта на въртене, така че тя винаги да бъде пропорционална на интензитета **B** (фиг. 8.11). Ако направите това, ще спрете на някаква крайна ориентация на спиновите оси и тогава амплитудите C_1 и C_2 ще се получават като нейни проекции (с помощта на (8.30)) върху вашата координатна система.



Фиг. 8.11. Посоката на спина на електрона в променливо магнитно поле $\mathbf{B}(t)$ пресецира с честота $\vec{\omega}(t)$ около ос, успоредна на **B**

Виждате, че това представлява чисто геометрична задача: трябва да отбележите само къде са свършили вашите въртения. Макар, че е ясно какво е необходимо за това, тази геометрична задача (намирането на крайния резултат от въртене с променлива векторна скорост) не се решава лесно в общия случай. Във всеки случай, по *принцип* имаме общото решение за всяка задача с две състояния. В следващата глава по-подробно ще обсъдим математическата техника за разглеждане на частици със спин 1/2 и следователно, третирането на системи, които в общия случай имат две крайни състояния.

9

Още системи с две състояния

9-1. Спинови матрици на Паули

9-2. Спиновите матрици като оператори

9-3. Решение на уравнението за две състояния

9-5. Състояния на поляризация на фотона

9-5. Неутрален K-мезон

9-6. Обобщение за система с N състояния

9-1. Спинови матрици на Паули

Продължаваме обсъждането на свойствата на системи с две енергетични нива. В края на предишната глава говорихме за частици със спин 1/2 в магнитно поле. Тогава описвахме спиновите състояния, задавайки амплитудите C_1 и C_2 за това, z-компонентата на спиновия момент на количество на движение да са равни на $+\frac{\hbar}{2}$ или $-\frac{\hbar}{2}$. По-рано тези базисни състояния означавахме с $|+>$ и $|->$. Нека пак да работим с тях, макар че когато се наложи, ще ги заменяме с $|1>$ и $|2>$.

В последната глава видяхме, че когато частица със спин 1/2 и магнитен момент μ се намира в магнитно поле $\mathbf{B}=(B_x, B_y, B_z)$, то амплитудите $C_+(=C_1)$ и $C_-(=C_2)$ са свързани със следните диференциални уравнения:

$$i\hbar\frac{dC_+}{dt}=-\mu[B_zC_+ + (B_x-iB_y)C_-],$$
$$i\hbar\frac{dC_-}{dt}=-\mu[(B_x+iB_y)C_+ - B_zC_-]. \tag{9.1}$$

С други думи, матрицата — хамилтониан H_{ij} има вида

$$H_{11}=-\mu B_z, \qquad H_{12}=-\mu(B_x-iB_y),$$
$$H_{21}=-\mu(B_x+iB_y), \qquad H_{22}=\mu B_z. \tag{9.2}$$

и, разбира се, (9.1) са еквивалентни на

$$i\hbar\frac{dC_i}{dt}=\sum_j H_{ij}C_j, \tag{9.3}$$

където i и j приемат стойностите $+$ и $-$.

Тази система с две състояния — спина на електрона — е толкова важна, че е много полезно да се намери някакъв по-акуратен и изящен начин за нейното описание. Сега ще направим неголямо математично отклонение, за да покажем как обикновено се записват уравненията за системи с две състояния. Първо, обърнете внимание, че всеки член на хамилтониана е пропорционален на μ и на някоя от компонентите на $\mathbf{B}$; затова (*чисто формално*) може да се напише:

$$H_{ij}=-\mu[\sigma_{ij}^x B_x + \sigma_{ij}^y B_y + \sigma_{ij}^z B_z]. \tag{9.4}$$

Тук няма никаква нова физика; тези уравнения означават, че коефициентите σ_{ij}^x, σ_{ij}^y и σ_{ij}^z — те са $4\times3=12$ на брой могат да бъдат представени по такъв начин, че (9.4) да съответствува на (9.2).

Да видим защо е така. Да започнем с B_z. Понеже B_z се среща само в H_{11} и H_{22}, всичко ще бъде наред, ако приемем

$$\sigma_{11}^z=1, \qquad \sigma_{12}^z=0,$$
$$\sigma_{21}^z=0, \qquad \sigma_{22}^z=-1.$$

Матрицата H_{ij} се записва във вида

$$H_{ij}=\begin{matrix} i\downarrow \\ \\ \end{matrix}\begin{matrix} \overrightarrow{j} \\ \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \end{matrix}.$$

Така че хамилтонианът на частица със спин 1/2 и магнитно поле $\mathbf{B}$ ще бъде:

$$H_{ij}=\begin{matrix} \\ i\downarrow \end{matrix}\overset{\begin{matrix} j\rightarrow \end{matrix}}{\begin{pmatrix} -\mu B_z & -\mu(B_x-iB_y) \\ -\mu(B_x+iB_y) & \mu B_z \end{pmatrix}}.$$

По същия начин и коефициентите σ^z_{ij} може да се запишат във вид на матрица

$$\sigma^z_{ij}=\begin{matrix} \\ i\downarrow \end{matrix}\overset{\begin{matrix} j\rightarrow \end{matrix}}{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}. \tag{9.5}$$

Изписвайки коефициентите пред B_x получаваме, че елементите на матрицата σ_x трябва да имат вида

$$\sigma^x_{11}=0, \qquad \sigma^x_{12}=1,$$
$$\sigma^x_{21}=1, \qquad \sigma^x_{22}=0$$

или съкратено

$$\sigma^x_{ij}=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{9.6}$$

И накрая, за B_y получаваме

$$\sigma^y_{11}=0, \qquad \sigma^y_{12}=-i,$$
$$\sigma^y_{21}=i, \qquad \sigma^y_{22}=0$$

или

$$\sigma^y_{ij}=\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \tag{9.7}$$

Ако трите матрици σ се определят по този начин, то уравнения (9.2) и (9.4) съвпадат. За да оставим място за индексите i и j, отбелязахме коя σ пред коя компонента на **B** стои, поставяйки индекси x, y и z горе. Обикновено обаче индексите i и j се изпускат, а индексите x, y и z се поставят долу. Тогава (9.4) се записва така:

$$H=-\mu[\sigma_x B_x+\sigma_y B_y+\sigma_z B_z]. \tag{9.8}$$

Таблица 9.1

Спинови матрици на Паули

$$\sigma_z=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x=\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y=\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$1=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Матриците σ са толкова важни (те се използуват непрекъснато), че ги написахме като таблица —9.1. (Онези от вас, които се готвят да работят в областта на квантовата механика, са длъжни да ги помнят наизуст.) Те се наричат още *спинови матрици на Паули* — на името на физика, който ги е измислил.

В таблицата включихме още една квадратна матрица от втори ранг, която става необходима, когато искаме да разгледаме система, двете спинови състояния на която имат еднаква енергия, или когато искаме да преминем към друга нулева енергия. В такива случаи към първото уравнение (9.1) се налага да добавим E_0C_+, а към второто E_0C_-. Това може да се отчете с въвеждането на ново означение — *единичната матрица* „1“ или δ_{ij}:

$$1=\delta_{ij}=\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{9.9}$$

а (9.8) можем да напишем във вида:

$$H_{ij}=E_0\delta_{ij}-\mu\,(\sigma_x B_x+\sigma_y B_y+\sigma_z B_z)_{ij}\ . \tag{9.10}$$

Обикновено *се подразбира без излишна уговорка*, че всяка константа, подобна на E_0, автоматически се умножава с единичната матрица и тогава можем да напишем

$$H=E_0-\mu(\sigma_x B_x+\sigma_y B_y+\sigma_z B_z)\ . \tag{9.11}$$

Една от причините, поради която спиновите матрици са така полезни, е тази, че *всяка* 2×2 матрица може да бъде изразена чрез тях. Във всяка матрица стоят четири числа, например

$$M=\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}.$$

Тя винаги може да бъде написана като линейна комбинация на четири матрици. Например

$$M=a\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}+b\begin{pmatrix}0 & 1\\ 0 & 1\end{pmatrix}+c\begin{pmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{pmatrix}+d\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}.$$

Това може да се направи по различни начини, но в нашия частен случай може да се каже, че M се състои от някакво количество σ_x плюс някакво количество σ_y и т. н., и да напишем

$$M=\alpha\,1+\beta\sigma_x+\gamma\sigma_y+\delta\sigma_z,$$

където „количествата“ α, β, γ и δ в общия случай могат да бъдат комплексни числа.

Щом като всяка 2×2 матрица може да бъде изразена чрез единичната матрица и матриците сигма, ние притежаваме всичко, което е необходимо за *всяка* система с две състояния. Каквато и да е система с две състояния — амонячна молекула, молекула на боята фуксин, каквото искате — хамилтонианът на уравнението може да бъде написан чрез сигми. Макар че в случая на електрон в магнитно поле сигмите имат геометричен смисъл, в общия случай можем да ги считаме само като полезни матрици, удобни за всяка система с две състояния.

Например единият от начините за разглеждане на протона и неутрона е представянето им като една частица с две състояния. Казваме, че *нуклонът* (протон или неутрон) е система с две състояния, в дадения случай — спрямо електричния заряд. Ако нуклонът се разглежда по такъв начин, състоянието $|1>$ ще представя протонът, а състоянието $|2>$ — неутронът. Казва се, че нуклонът има две състояния на „изоспина“.

Понеже ще прилагаме матриците сигма като „аритметика“ на квантовомеханичните системи с две състояния, нека се запознаем с правилата на матричната алгебра. Под сума на две или повече матрици се разбира точно това, което се задава с уравнение (9.4). Изобщо, ако „събираме“ двете матрици A и B, то „сумата“ C означава, че всеки неин елемент се дава с формулата

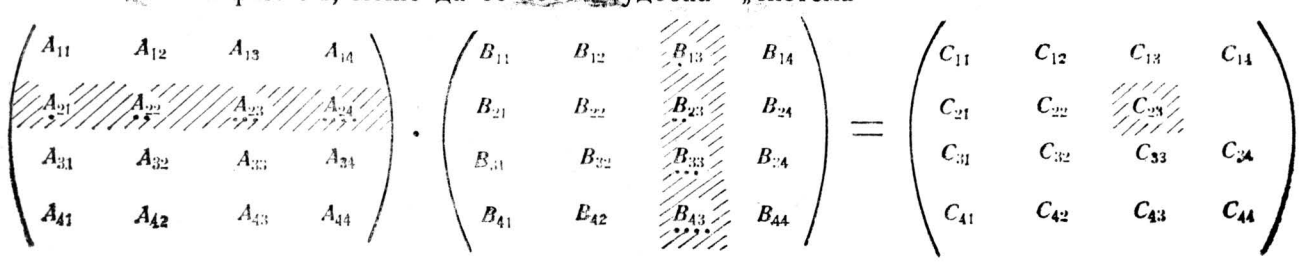
$$C_{ij}=A_{ij}+B_{ij}.$$

Всеки елемент на C е просто сума на елементите на A и B, стоящи на съответните места.

В гл. 3, § 6 вече се срещахме с матричното „произведение“ Същата идея се използува и при работа с матриците сигма. В общия случай „произведението“ на две матрици A и B (именно в такъв ред) се определя като матрицата C с елементи

$$C_{ij}=\sum_k A_{ik}\,B_{kj}. \tag{9.12}$$

Това представлява сума от произведения на елементи, взети по двойки от i-тия ред на матрицата A и k-тия стълб на матрицата B. Ако матриците са написани във вид на таблици, както това е показано на фиг. 9.1, може да се посочи удобна „система“



Пример: $C_{23}=A_{21}B_{13}+A_{22}B_{23}+A_{23}B_{33}+A_{24}B_{43}$

Фиг. 9.1. Умножение на две матрици

за получаване на елементите на матрицата-произведение. Например искате да изчислите елемента C_{23}. Движете левия показалец *по втория ред на A*, а десния показалец — *по третия стълб на B*, умножавайки всяка двойка числа и сумирайки ги в хода на движението. Опитахме се да изобразим това на фиг. 9.1.

За квадратна двумерна матрица това изглежда особено просто. Например σ_x умножаваме на σ_x и получаваме

$$\sigma_x \cdot \sigma_x = \sigma_x^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

т. е. просто единичната матрица. Или нека да пресметнем още

$$\sigma_x \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \cdot$$

Като погледнете в табл. 9.1, ще видите, че това е матрицата σ_z, умножена на i. (Спомнете си, че умножаването на матрица с число е равносилно на умножаването на всеки неин елемент с това число.) Умноженията на матриците сигма помежду им са много важни и затова сме ги представили в табл. 9.2. Вие можете сами да ги проверите, както това беше направено за σ_x^2 или $\sigma_x \sigma_y$.

Таблица 9.2

Произведения на спиновите матрици

$\sigma_x^2 = 1$
$\sigma_y^2 = 1$
$\sigma_z^2 = 1$
$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = i\,\sigma_z$
$\sigma_y\sigma_z = -\sigma_z\sigma_y = i\,\sigma_x$
$\sigma_z\sigma_x = -\sigma_x\sigma_z = i\,\sigma_y$

С матриците σ е свързан още един интересен и важен момент. Ако искате, представете си, че трите матрици σ_x, σ_y и σ_z са трите компоненти на един вектор — наричат го понякога „вектор сигма“ и го означават σ. В действителност това е „матричен вектор“ или „векторна матрица“. Това са три различни матрици, всяка свързана със своя ос x, y и z. С тяхна помощ хамилтонианът на системата може да се запише в красив вид, удобен за всяка координатна система:

$$H = -\mu\, \vec{\sigma} \cdot \mathbf{B}\,. \tag{9.13}$$

Макар и да сме записали тези матрици в представяне, в което понятията „нагоре“ и „надолу“ да се отнасят за посоката (така че σ_z изглежда особено просто), можем да си представим как изглеждат и във всяко друго представяне. Необходими са дълги пресмятания, но може да се покаже, че те се изменят като компонентите на един вектор. (За сега няма да доказваме това, но ако искате, можете сами да извършите пресмятанията.) Можете да използувате σ в различни координатни системи, както това се прави при векторите.

Помните, че в квантовата механика хамилтонианът е свързан с енергията. Той наистина съвпада точно с енергията в този прост случай, когато състоянието е само едно. Даже в система с две състояния, каквато представлява спинът на електрона, ако хамилтонианът се запише във вида (9.13), той много напомня *класическата* формула за енергията на магнит с магнитен момент $\vec{\mu}$ в магнитно поле $\mathbf{B}$:

$$U = -\vec{\mu} \cdot \mathbf{B}, \tag{9.14}$$

където $\vec{\mu}$ е свойство на обекта, а $\mathbf{B}$ — външното поле.
Може да се предположи, че (9.14) се превръща в (9.13), ако класическата енергия се замени с хамилтониана, а класическото $\vec{\mu}$ — с матрицата $\mu\vec{\sigma}$. Тогава след такава чисто формална замяна резултатът може да се интерпретира като матрично уравнение. Понякога се твърди, че на всяка величина в класическата физика съответствува определена квантовомеханична матрица. В действителност правилно би било да казваме, че матрицата на Хамилтон съответствува на класическата енергия и че на всяка величина, която може да бъде определена чрез енергията, съответствува определена матрица.

Например магнитният момент може да се определи чрез енергията, като кажем, че енергията на външното поле $\mathbf{B}$ е $-\vec{\mu} \cdot \mathbf{B}$.

Това *определя* вектора на магнитния момент $\vec{\mu}$. След това, като гледаме формулата за хамилтониана на реалния (квантов) обект в магнитното поле, се опитваме да налучкваме какви матрици съответствуват на една или друга величина от класическата формула. С помощта на подобен трик *понякога за някои* класически величини се появяват квантовите им двойници.

Ако искате, опитайте да разберете как и в какъв смисъл класическият вектор $\vec{\mu}$ е равен на матрицата $\mu\vec{\sigma}$; може би ще откриете нещо. Но по-добре не си блъскайте главата; по-точно — не си струва: в действителност те *не са равни*. Квантовата механика е съвсем друг вид теория, друга представа за света. Понякога се случва и някое съответствие, но едва ли зад това се крие нещо повече от обикновено мнемонично средство — правило за запомняне.

И така от класическата физика вие запомняте (9.14), а след това въз основа на съответствието $\vec{\mu} \to \mu\vec{\sigma}$ можете да напишете (9.13). Разбира се, природата действува според *квантовата* механика, а класическата представлява само нейно приближение. Така че няма нищо загадъчно в това, че в класическата механика се забелязват някои сенки на квантовомеханични закономерности. Не е възможно да се възстановяват реалните обекти направо по техните сенки, но все пак често сянката може да ни помогне да си спомним как изглежда истинският обект. Истинско е уравнението (9.13), докато уравнението (9.14) е неговата сянка. Ние първоначално изучаваме класическата механика и затова ни се иска от нея да извлечем квантовите формули, но веднъж завинаги установена схема за това не съществува. Налага се всеки път да се обръщаме назад към реалния свят и да откриваме верните квантовомеханични уравнения. А когато те приличат на нещо познато, ние се радваме.

Ако тези схващания ви се струват неприемливи, ако според вас тук се изричат стари истини за отношението между класическата и квантова физика, то моля за извинение: явно при мене заработи условният рефлекс на преподавател, който е свикнал да втълпява квантовата механика на студенти, които преди това не са чували нищо за спиновите матрици на Паули. Винаги ми се е струвало, че те не губят надеждата да изведат квантовата механика като логично следствие на класическата механика — — тази, която старателно са учили преди години. (Може би те просто искат да минат, без да изучават нещо ново.) Но за щастие, вие научихте класическата формула (9.14) само преди няколко месеца, и то с уговорката, че тя не е съвсем вярна, така че може би ще можете да възприемате квантовата формула (9.13) като първична истина.

9-2. Спиновите матрици като оператори

Щом веднаж сме се заели с математическите означения, иска ми се да опишем *още един* начин на записване, употребяван често поради своята краткост. Той следва направо от въведените в гл. 6 означения. Ако имаме система в състояние $|\psi(t)>$, изменящо се с времето, можем, както направихме това с уравнение (6.31), да напишем амплитудата за това, в момент $t+\Delta t$ системата да се окаже в състояние $|i>$ във вида

$$<i|\psi(t+\Delta t)>=\sum_j <i|U(t,\ t+\Delta t)|j><j|\psi(t)>$$

Матричният елемент $<i|U(t,\ t+\Delta t)|j>$ дава амплитудата за това, базисното състояние $|j>$ за време Δt да се превърне в базисното състояние $|i>$. След това *определяме* H_{ij} с помощта на

$$<i|U(t,\ t+\Delta t)|j>=\delta_{ij}-\frac{i}{\hbar}H_{ij}(t)\,\Delta t$$

и установяваме, че амплитудите $C_i(t) = \langle i \mid \psi(t) \rangle$ са свързани с диференциалните уравнения

$$i\hbar \frac{dC_i}{dt} = \sum_j H_{ij} C_j \,. \tag{9.15}$$

Ако запишем в явен вид амплитудите C_i, същото ще изглежда

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle i \mid \psi \rangle = \sum_j H_{ij} \langle j \mid \psi \rangle \,. \tag{9.16}$$

По-нататък матричните елементи H_{ij} са също амплитуди, които могат да бъдат записани във вида $\langle i \mid H \mid j \rangle$, тогава нашето диференциално уравнение ще изглежда така:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle i \mid \psi \rangle = \sum_j \langle i \mid H \mid j \rangle \langle j \mid \psi \rangle \,. \tag{9.17}$$

Виждаме, че $-\frac{i}{\hbar} \langle i \mid H \mid j \rangle$ представлява амплитуда за това, че при физическите условия, описвани от матрицата H, състояният^{o} $\mid j \rangle$ за време dt „генерира“ (поражда) състоянието $\mid i \rangle$. (Всичко това неявно се подразбираше в разсъжденията в гл. 6, § 4.)

Сега, като следваме идеите от гл. 6, § 2, можем да съкратим общия „множител“ $\langle i \mid$ в (9.17), понеже (9.17) е в сила при всички $\mid i \rangle$, и да запишем това уравнение във вида

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mid \psi \rangle = \sum_j H \mid j \rangle \langle j \mid \psi \rangle . \tag{9.18}$$

Или като направим още една крачка в същата посока, премахвайки също и j, можем да напишем окончателно

$$i\hbar \frac{d}{dt} \mid \psi \rangle = H \mid \psi \rangle . \tag{9.19}$$

В гл. 6 посочихме, че при такова записване на H той се нарича *оператор*. Отсега нататък върху операторите ще поставяме малки шапчици ($\frown$), за да напомняме, че това е оператор, а не число. Ще пишем $\hat{H} \mid \psi \rangle$, макар уравнения (9.18) и (9.19) *да означават напълно едно и също нещо*, както и уравнения (9.15) и (9.17), ние можем да ги мислим за съвършено различни. Например уравнение (9.18) може да се опише така: „Производната на *вектора на състоянието* $\mid \psi \rangle$ е равна на това, което се получава от действието на *оператора* на Хамилтон $\hat{H}$ върху всяко от базисните състояния, умножено на амплитудата $\langle j \mid \psi \rangle$ за това, ψ да се окаже в състоянието j и след това сумирано по всички j“. Или уравнение (9.19) може да се опише така: „Производната по времето (умножена на $i\hbar$) от състоянието $\mid \psi \rangle$ е равна на това, което се получава при действието на хамилтониана $\hat{H}$ върху вектора на състоянието $\mid \psi \rangle$“. Това е просто съкратен начин за записване на израза, който се съдържа в (9.17), но както по-късно ще се убедите, той може да се окаже много по-удобен.

Ако искате, идеята на „абстрахирането“ може да се придвижи още една крачка напред. Уравнение (9.19) е вярно *за всяко състояние* $\mid \psi \rangle$. Освен това лявата страна $i\hbar \frac{d}{dt}$ е също оператор, чието действие е: „диференцирай по t и умножи с $i\hbar$.“ Така че (9.19) може да се разглежда като уравнение между оператори, т. е. това е операторно уравнение:

$$i\hbar \frac{d}{dt} = \hat{H} \,.$$

Операторът на Хамилтон (с точност до константа), действувайки на което и да е състояние, води до резултат, какъвто би дал и $\frac{d}{dt}$. Помнете, че това уравнение, както и (9.19), *не означава*, че операторът $\hat{H}$ е просто същата *операция* $\frac{d}{dt}$. Тези урав-

нения задават динамичния закон (закона за движението) на квантовите системи.

За да се упражним с тези представяния, ще ви покажа друг извод на уравнение (9.18). Знаете, че всяко състояние $|\psi>$ може да бъде записано чрез неговите проекции върху някакъв базис [вж. (6.8)]:

$$|\psi>=\sum_i |i><i|\psi> . \tag{9.20}$$

Как ще се изменя $|\psi>$ с времето? Нека го диференцираме:

$$\frac{d}{dt}|\psi>=\frac{d}{dt}\sum_i |i><i|\psi>. \tag{9.21}$$

Но базисните състояния $|i>$ не се изменят с времето (поне *при нас* те бяха определени, неизменни с времето състояния) и само амплитудите $<i|\psi>$ са числа, които могат да се менят. С други думи, (9.21) може да се напише така:

$$\frac{d}{dt}|\psi>=\sum_i |i>\frac{d}{dt}<i|\psi> . \tag{9.22}$$

Но както знаете, според (9.16) $\frac{d}{dt}<i|\psi>$ е равно на $\frac{1}{i\hbar}\sum_j H_{ij}<j|\psi>$, така че получаваме

$$\frac{d}{dt}|\psi>=-\frac{i}{\hbar}\sum_i |i>\sum_j H_{ij}<j|\psi>$$

$$=-\frac{i}{\hbar}\sum_{ij}|i><i|H|j><j|\psi>=-\frac{i}{\hbar}\sum_j H|j><j|\psi>.$$

А това е пак уравнение (9.18).

И така хамилтонианът може да се интерпретира различно. Възможно е съвкупността от коефициенти H_{ij} да се третира като „компания" от числа; може да се говори за „амплитудите" $<i|H|j>$ или за матрицата H_{ij}, а може да се счита и за „оператора $\hat{H}$". Всичко това е едно и също нещо.

Да се върнем сега към нашата система с две състояния. Ако сме записали хамилтониана с помощта на матриците сигма (с подходящи числени множители такива като B_x и т. н. естествено е σ^x_{ij} да се разглеждат като амплитуди $<i|\sigma_x|j>$ или по-кратко, като оператор $\hat{\sigma_x}$. Ако се приложи идеята за оператора, уравнението на движение за състоянието $|\psi>$ в магнитно поле може да се напише във вида

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi>=-\mu(B_x\hat{\sigma_x}+B_y\hat{\sigma_y}+B_z\hat{\sigma_z})|\psi>. \tag{9.23}$$

Когато се наложи да използуваме това уравнение, разбира се, трябва $|\psi>$ да бъде изразено чрез базисните вектори (което е равносилно на намиране на компонентите на пространствените вектори, когато задачата се решава до числа). Така че обикновено се предпочита написването на (9.23) в по-явен вид

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi>=-\mu\sum_i(B_x\hat{\sigma_x}+B_y\hat{\sigma_y}+B_z\hat{\sigma_z})|i><i|\psi>. \tag{9.24}$$

Сега ще видите в какво е красотата на идеята за операторите. За да се приложи това уравнение, необходимо е да се знае какво се получава, когато операторът $\hat{\sigma}$ действува върху всяко от базисните състояния. Нека напишем това $\hat{\sigma_z}|+>$; явно то ще бъде някакъв нов вектор $|?>$, но точно какъв? Да го умножим отляво с $<+|$ и ще получим

$$<+|\hat{\sigma_z}|+>=\sigma_{z11}=1$$

(използуваме табл. 9.1). По такъв начин узнаваме, че

$$<+|?>=1. \tag{9.25}$$

Сега нека умножим $\hat{\sigma}_z|+>$ с $<-|$ отляво. Получаваме

$$<-|\hat{\sigma}_z|+>=\sigma_{z21}=0,$$

т. е.

$$<-|?>=0. \tag{9.26}$$

Съществува само един вектор, удовлетворяващ (9.25) и (9.26) това е $|+>$. Така намираме, че

$$\hat{\sigma}_z|+>=|+>. \tag{9.27}$$

Таблица 9.3

Свойства на оператора $\hat{\sigma}$

$\sigma_z\|+>=\|+>$
$\sigma_z\|->=-\|->$
$\sigma_x\|+>=\|->$
$\sigma_x\|->=\|+>$
$\sigma_y\|+>=i\|->$
$\sigma_y\|->=-i\|+>$

С аналогични разсъждения лесно може да се покаже, че всички свойства на матриците сигма в операторни означения могат да бъдат описани с редица правила, представени от нас в табл. 9.3.

Ако имаме произведение от две матрици сигма, то е равносилно на произведение на два оператора сигма. Когато два оператора стоят един до друг като произведение, отначало действува стоящият отдясно. Например под $\hat{\sigma}_x . \hat{\sigma}_y|+>$ трябва да се разбира $\hat{\sigma}_x(\hat{\sigma}_y|+>)$. От табл. 9.3 имаме $\hat{\sigma}_y|+>=i|->$, така че получаваме

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y|+>=\hat{\sigma}_x(i|->). \tag{9.28}$$

Числата (като например, i) преминават „гратис“ през операторите (операторите действуват само върху векторите на състоянията); следователно (9.28) ще стане

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y|+>=i\hat{\sigma}_x|->=i|+>.$$

Ако извършим същото с $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y|->$, ще получим

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y|->=-i|-> .$$

Сега ако погледнете табл. 9.3, ще видите, че $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y$, действувайки върху $|+>$ или $|->$, дава точно същото, както и действието на $\hat{\sigma}_z$, умножено с $-i$. Затова може да се каже, че операцията $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y$ съвпада с операцията $i\hat{\sigma}_z$ и да се запише

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y=i\hat{\sigma}_z . \tag{9.29}$$

И така отново достигаме до съответствие между матричната и операторната гледни точки. Затова всяко от уравненията в табл. 9.2 може да се разглежда и като уравнение за операторите сигма. Лесно може да се провери, че те наистина следват от табл. 9.3. Когато се работи с тези неща, не е необходимо да се следи дали величини от типа H или σ са оператори или матрици. За каквито и да ги смятаме, уравненията се получават едни и същи, така че табл. 9.2 може при желание да се прилага както за операторите сигма, така и за матриците сигма.

9-3. Решение на уравнението за две състояния

Сега вече уравнението за две състояния може да бъде написано по два начина:

$$i\hbar\frac{dC_1}{dt}=\sum_j H_{ij}C_j$$

или

$$i\hbar\frac{d|\psi>}{dt}=\hat{H}|\psi>. \tag{9.30}$$

И двете означават едно и също нещо. За частици със спин 1/2 в магнитно поле хамилтонианът H ще се дава с уравнение (9.8) или (9.13).

Ако полето е насочено по z, както вече много пъти видяхме, решението показва, че всяко състояние $|\psi>$, каквото и да бъде то, прецисира около оста z (като всяко тяло, което се върти около оста z) с ъглова скорост два пъти по-голяма от $\mu B/\hbar$. Разбира се, щом физиката на процеса не зависи от координатната система, всичко това се отнася и за магнитно поле, насочено под друг ъгъл. Ако магнитното поле се изменя от време на време по някакъв сложен начин, това може да се анализира по следния начин. Нека първоначално спинът да бъде насочен в посоката $+z$, а магнитното поле — в посока x. Тогава спинът започва да се върти. Щом се изключи външното x-поле, това движение се прекратява. Ако сега се включи поле в посока z, спинът започва да се върти около тази ос и т. н. Следователно в зависимост от това как се изменя полето с времето вие можете да си представите какво ще бъде крайното състояние — по коя ос ще бъде насочено то. След това с помощта на проекционните оператори, изведени в гл. 8 (или гл. 4), това състояние може да се отнесе към първоначалните състояния $|+>$ и $|->$. Ако в крайното състояние спинът има посока (θ,φ), амплитудата спинът да бъде насочен нагоре е равна на $\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{-i\varphi/2}$, а амплитудата спинът да бъде насочен надолу е $\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) e^{i\varphi/2}$. Така се решава всяка подобна задача. Това всъщност е словесното описание на решението на диференциалното уравнение.

Така описаното решение е достатъчно общо и може да служи при *всички системи с две състояния*. Да вземем случая с амонячната молекула в електростатично поле. Ако системата се описва на езика на състоянията $|I>$ и $|II>$, уравненията ще имат следния вид:

$$i\hbar\frac{dC_{\mathrm{I}}}{dt}=+AC_{\mathrm{I}}+\mu\mathscr{E}C_{\mathrm{II}},$$

$$i\hbar\frac{dC_{II}}{dt}=-AC_{II}+\mu\mathscr{E}C_{I}\ . \qquad (9.31)$$

Вие бихте възразили: „Но там имаше още един член E_0“. Това не е важно, ние просто сме преместили началото на енергетичната координатна система, така че E_0 да стане равно на нула. (Това може да се направи винаги, като изменим и двете амплитуди по един и същ начин: $e^{iE_0T/\hbar}$ пъти; по такъв начин можем да се избавим от всяка постоянна добавка към енергията.) Еднакви уравнения притежават еднакви решения и затова не си заслужава да ги решаваме повторно. Ако сравните горните уравнения с уравнения (9.1), можете да ги отъждествите по следния начин. Нека състоянието $|+>$ означим с $|I>$, а състоянието $|->$ — с $|II>$. Това *съвсем не означава*, че построяваме амоняка в една линия или че $|+>$ и $|->$ са по някакъв начин свързани с оста z. Всичко това се прави изкуствено. Имаме изкуствено пространство, което бихме могли да наречем например „модел на пространството на амонячната молекула“ или нещо подобно. Това е просто тримерна „диаграма“ и посоката „нагоре“ означава пребиваване на молекулата в състояние $|I>$, а посоката „надолу“ по фалшивата ос z означава пребиваване на молекулата в състояние $|II>$. Тогава можем да отъждествим уравненията по следния начин.

Преди всичко виждате, че хамилтонианът може да бъде записан чрез матриците сигма

$$H=+A\sigma_z+\mu\mathscr{E}\sigma_x. \qquad (9.32)$$

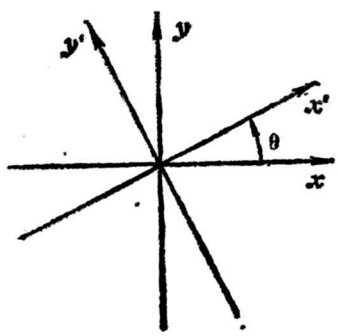
Ако сравним това с (9.1), μB_z ще съответствува на $-A$, а μB_x — на $-\mu\mathscr{E}$. В нашето „моделно“ пространство като че ли възниква постоянно поле $\mathbf{B}$, насочено по оста z. Ако освен това имаме изменящо се с времето електрично поле $\mathscr{E}$, към полето $\mathbf{B}$ ще се появи и пропорционално меняща се x-компонента. По такъв начин *поведението на електрона в магнитно поле с*

постоянна компонента в посока z и трептяща компонента в посока x математически е напълно подобно и напълно съответствува на поведението на амонячната молекула в електрично поле. За съжаление нямаме достатъчно време, за да навлизаме в детайлите на това съответствие или да разглеждаме някои технически подробности. Искахме само да подчертаем, че може да се направи така, че всички системи с две състояния да бъдат аналогични на обект със спин 1/2, прецесиращ в магнитно поле.

9-4. Състояния на поляризация на фотона

Съществуват още много други системи с две състояния, интересни за изучаване, и първата, която бихме искали да разгледаме, е фотонът. За да се опише фотонът, е необходимо отначало да се зададе векторът на неговия импулс. При свободния фотон импулсът определя и неговата честота, и не е необходимо тя да бъде специално посочвана. Но остава още едно свойство, наречено поляризация. Представете си фотон, насочен срещу вас, с определена монохроматична честота (която ще считаме за постоянна, така че да не става нужда да се говори за множество състояния на импулса). Тогава съществуват две посоки на поляризация на фотона. Според класическата теория светлината притежава или хоризонтално трептящо електрично поле, или вертикално такова; тези два различни вида светлина се наричат x-поляризирана и y-поляризирана светлина. В същност тя може да бъде поляризирана и в друга посока, но това може да се постигне чрез суперпозиция на полетата в x- и y-посоки. Ако пък вземем x- и y-компонентите с отместени на 90° фази, можем да получим въртящо се електрично поле — светлината ще бъде елиптично поляризирана. (Това е кратко напомняне на класическата теория на поляризираната светлина, която подробно изучихме в гл. 33, т. I.)

Нека сега да имаме *единичен* фотон. Вече не съществува електрично поле, което да разглеждаме по горния начин. Имаме *един-единствен* фотон и нищо повече. Но и сега трябва да съществува някаква аналогия на класическото явление поляризация. Следователно трябва да съществуват поне два вида фотони. Първоначално изглежда, че трябва да съществуват безкрайно много, щом като електричният вектор може да бъде насочен в която и да е посока, но в действителност поляризацията на фотона може да бъде описана с помощта на система с две състояния. Фотонът може да бъде или в състояние $|x>$, или в състояние $|y>$. Под $|x>$ се разбира състоянието на поляризация на всеки един от фотоните в сноп, който е класически x-поляризиран. А $|y>$ означава състоянието на поляризация, в което се намират фотоните в y-поляризиран сноп. Тези $|x>$- и $|y>$-състояния можете да изберете като базисни състояния на фотона с импулс в посока z. И така съществуват две базисни състояния $|x>$ и $|y>$ и те са напълно достатъчни за описване на всякакъв фотон.



Фиг. 9.2. Координатните оси, перпендикулярни към вектора на импулса на фотона

Ако имате например поляроид, оста на който е разположена така, че да пропуска светлина, поляризирана в приетата от нас посока x, и ако върху него е насочен друг фотон, който се намира в състояние $|y>$, той ще се погълне от поляроида. Ако върху него се насочи фотон в състояние $|x>$, той ще излезе от поляроида в същото състояние $|x>$. Когато взимаме парче калцит (исландски шпат), който разделя падащата върху него светлина на x- и y-поляризирани снопове, той действува напълно аналогично на прибора на Щерн — Герлах, който разцепваше снопа от сребърни атоми на две състояния: $|+>$ и $|->$. Значи, всичко, което правихме с атомите чрез приборите на Щерн — Герлах, сега можем да повторим със светлината с помощта на парче поляроид. А какво може да се каже за светлина, преминала през поляроид, завъртян под ъгъл θ? Друго ли е това състоя-

сие? Да, наистина това е *друго* състояние. Да означим оста на поляроида с x', за да я различаваме от осите на нашите базисни състояния (фиг. 9.2). Излизащият навън фотон ще бъде в състояние $|x'\rangle$. Но всяко състояние може да се представи като линейна комбинация на базисните състояния във вида:

$$|x'\rangle = \cos\theta\,|x\rangle + \sin\theta\,|y\rangle. \qquad (9.33)$$

С други думи, ако фотон премине през завъртян на ъгъл θ (спрямо x) поляроид, той може да бъде „разложен“ на $|x\rangle$ и $|y\rangle$ – снопове. Ако искате, можете да си го представите разложен на x- и y-компоненти. Вие винаги ще получавате амплитуда $\cos\theta$ за това, фотонът да бъде в $|x\rangle$-състояние и амплитуда $\sin\theta$ да бъде в $|y\rangle$-състояние.

Сега да поставим следния въпрос: имаме фотон, поляризиран в посока x' от поляроид, завъртян на ъгъл θ, и този фотон попада върху друг поляроид, завъртян под нулев ъгъл (фиг. 9.3). Какво ще стане с него? Каква е вероятността той да премине през него? *Отговорът е*: Преминавайки през първия поляроид, фотонът ще се окаже в състояние $|x'\rangle$; този фотон би преминал през втория поляроид само ако беше в състояние $|x\rangle$ (и би се погълнал, ако е в състояние $|y\rangle$). Следователно пак ни интересува каква е вероятността след първия поляроид фотонът да бъде в състояние $|x\rangle$? Тази вероятност ще получим от квадрата на модула на амплитудата $\langle x|x'\rangle$ – амплитуда за това, фотон в състояние $|x'\rangle$ да се окаже в състояние $|x\rangle$. На какво е равна $\langle x\,|\,x'\rangle$? Умножавайки (9.33) на $\langle x\,|$, ще получим

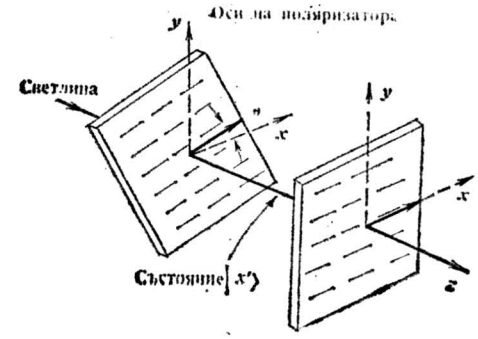
$$\langle x\,|\,x'\rangle = \cos\theta\langle x\,|\,x\rangle + \sin\theta\langle x\,|\,y\rangle.$$

Но $\langle x\,|\,y\rangle = 0$, това следва от физиката, така *трябва* да бъде ако $|x\rangle$ и $|y\rangle$ са базисни състояния, а $\langle x\,|\,x\rangle = 1$. Така получаваме

$$\langle x\,|\,x'\rangle = \cos\theta$$

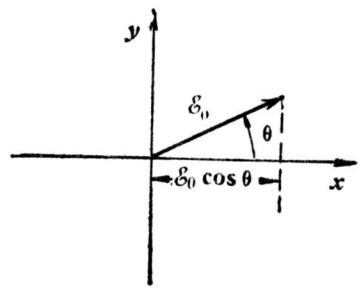
и вероятността ще бъде равна на $\cos^2\theta$. Ако например първият поляроид е завъртян на ъгъл 30°, то 3/4 от времето фотонът ще може да преминава през него, а 1/4 от времето ще се поглъща от поляроида, като при това го нагрява.

Да разгледаме сега тази ситуация от гледна точка на класическата физика. Там бихме имали сноп светлина, електричното поле на който ще се мени по някакъв начин — нека имаме например „неполяризиран“ сноп. След преминаването на този сноп през първия поляроид електричното поле щеше да трепти само в посоката x'; бихме го изобразили като вектор с максимална стойност, да кажем $\mathscr{E}_0$, под ъгъл θ спрямо оста x (фиг. 9.4). Ако след това светлината достигне до втория поляроид, през него ще премине само x-компонентата на $\mathscr{E}_0\cos\theta$. *Интензитетът* щеше да бъде пропорционален на квадрата на полето, т. е. $\mathscr{E}_0^2\cos^2\theta$. Следователно преминаващата през втория поляроид енергия ще бъде $\cos^2\theta$-пъти по-слаба от падащата върху него енергия.



Фиг. 9.3. Две поляроидни пластинки с ъгъл θ между равнините на поляризация

И класическата, и квантовата картина водят до един и същ резултат. Ако върху втория поляроид попаднат 10 милиарда фотона, а средната вероятност за преминаване е, да кажем, 3/4, това означава, че през него ще преминат 7,5 милиарда фотона. По същия начин и енергията, която бяха отнесли те, ще представлява 3/4 от енергията на падащия сноп. Класическата физика не говори нищо за статистиката на тези неща; тя просто твърди, че енергията, която ще премине през поляроида, е равна точно на 3/4 от енергията, падаща върху него. Това, разбира се, е безсмислено, ако фотонът е един единствен: не съществува 3/4 фотон. Той или преминава *целият*, или се поглъща изцяло и квантовата механика твърди, че той пребивава *цял в поляроида 3/4 от времето*. Връзката между двете теории е ясна.



Фиг. 9.4. Класическа картина на електричния вектор $\mathscr{E}$

А как стои работата с другите видове поляризации? Например с дясна кръгова поляризация? В класическата теория ком-

понентите x и y на дясно кръгово поляризираната светлина са отместени по фаза на 90°. В квантовата теория дясно кръгово поляризираният фотон притежава еднаква амплитуда да бъде $|x>$ или $|y>$ поляризиран, като тези амплитуди са отместени по фаза на 90°. Означавайки състоянието на „дясен“ фотон чрез $|Д>$, а на „ляв“ — с $|Л>$, можем да напишем (вж. гл. 1, § 33, т. I)

$$|Д>=\frac{1}{\sqrt{2}}(|x>+i|y>),$$
$$|Л>=-\frac{1}{\sqrt{2}}(|x>-i|y>). \tag{9.34}$$

(Множителят $1/\sqrt{2}$ е поставен от изискването за нормировка на състоянията.) С помощта на тези състояния, като прилагаме законите на квантовата теория може да се пресметнат всякакви ефекти, свързани с филтри и интерференции. Даже при желание състоянията $|Д>$ и $|Л>$ могат да се изберат за базисни и всичко да се представи чрез тях. Необходимо е само предварително да се убедим, че $<Д|Л>=0$, а това може да се направи лесно, като вземем комплексно спрегнатото на първото уравнение и го умножим на второто (вж. 6.13). Въобще можете да разлагате светлината, използувайки за базисни състояния x- и y-поляризациите или x'- и y'-поляризациите, а можете да използувате и дясно и ляво поляризираните състояния.

Опитайте се (просто за упражнение) да превърнете едните формули в другите. Например да представите състоянието $|x>$ като линейна комбинация на $|Д>$ и $|Л>$. Ето отговора:

$$|x>=\frac{1}{\sqrt{2}}(|Д>+|Л>),$$
$$|y>=-\frac{i}{\sqrt{2}}(|Д>-|Л>). \tag{9.35}$$

(Доказателство: събирате и изваждате двете уравнения (9.34). Преминаването от единия базис в другия става много лесно.)

Впрочем необходимо е да се направи една забележка. Ако фотонът е поляризиран дясно кръгово, той не е свързан никак с осите x и y. Ако го гледаме от друга координатна система, завъртяна спрямо посоката на полета на фотона под даден ъгъл, той, както и по-рано, ще бъде кръгово поляризиран. Дясно или ляво кръговите поляризации при всякакви въртения около посоката на полета не изменят вида си; това зависи от посоката (ако не се забравя, че посоката на фотона е зададена). Това е великолепно, нали? Тук не са необходими никакви оси. Но от друга страна, не е ли още по-чудно, че сумирайки ляво и дясно поляризираните снопове, можете да разберете какво е разположението на посоката на x? Но щом „дясно“ и „ляво“ не зависят от x или y, как можем да ги определим чрез тях? Отговора ще получим, ако напишем състоянието $|Д'>$, представящо фотон, дясно поляризиран в координатната система x' и y'. Ще имаме

$$|Д'>=\frac{1}{\sqrt{2}}(|x'>+i|y'>).$$

Как ще изглежда такова състояние на системата x, y? Да заместим тук $|x'>$ от (9.33) и съответно $|y'>$, което е равно на $(-\sin\theta)|x>+(\cos\theta)|y>$. Тогава получаваме:

$$|Д'>=\frac{1}{\sqrt{2}}[\cos\theta|x>+\sin\theta|y>-i\sin\theta|x>+i\cos\theta|y>]$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2}}[\cos\theta-i\sin\theta)|x>+i(\cos\theta-i\sin\theta)|y>]$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2}}(|x>+i|y>)(\cos\theta-i\sin\theta).$$

Но тук първият множител е просто $|Д>$, а вторият е $e^{-i\theta}$, така че получаваме

$$|Д'>=e^{-i\theta}|Д>. \tag{9.36}$$

Състоянията $|Д'>$ и $|Д>$ се различават само с фазов множител $e^{-i\theta}$. Ако се изчисли същото за $|Л'>$, ще получим[1]

$$|Л'>=e^{i\theta}|Л>. \tag{9.37}$$

Сега вече разбираме какво става. Сумирайки $|Д>$ и $|Л>$, получаваме нещо различно от това, което би се получило при сумирането на $|Д'>$ и $|Л'>$. Например x-поляризираният фотон [вж. (9.35)] ще бъде сума от $|Д>$ и $|Л>$, докато y-поляризираният фотон е сума с отместени фази — на $|Д>$ — назад с 90°, на $|Л>$ — с 90° напред. Това е същото, което би се получило от сумата на $|Д'>$ и $|Л'>$ при определен избор на ъгъла $\theta=90°$. В *примованата* координатна система x-поляризацията е еквивалентна на y-поляризацията в първоначалната система. Следователно не е съвсем вярно, че кръгово полязираният фотон изглежда еднакъв във всички координатни системи. Неговата *фаза* фазово отношение между ляво и дясно поляризираните състоя(ния) запомня посоката x.

9-5. Неутрален K-мезон[2]

Сега ще разгледаме система с две нива от света на т. нар. „странни частици" — система, за която квантовата механика води до поразителни резултати. Пълното описание на тази система изисква по-големи знания за физиката на странните частици, каквито ние за съжаление не притежаваме и затова ще се наложи да опростим някои неща. Сега накратко ще разкажем историята на това откритие, за да видите как са разсъждавали, за да достигнат до него. Всичко започна с изобретеното от Гел-Ман и Нишиджима понятие *странност* и свързания с него *закон за запазване на странността*. И когато Гел-Ман и Пайс анализираха следствията от тези представи, достигнаха до предсказването на забележителното откритие, за което искаме да разкажем. Но нека отначало кажем няколко думи за понятието „странност".

Да започнем с това какво се нарича *силно взаимодействие* на ядрените частици[3]. Съществуват взаимодействия, които обуславят мощните ядрени сили, различни например от относително по-слабите електромагнитни взаимодействия. Взаимодействието е „силно" в смисъл, че ако две частици се приближат една към друга така близко, че да имат възможност да взаимодействуват, те взаимодействуват така силно, че се появяват други частици. Ядрените частици участвуват също и в т. нар. „слабо взаимодействие", в резултат на което се извършват процеси, подобни на β-разпада; но те протичат много бавно (според ядрените мащаби на времето): слабите взаимодействия са с много-много порядъци по-слаби от силните взаимодействия, пък даже и от електромагнитните.

Когато с помощта на големите ускорители започнаха да изучават силните взаимодействия, всички бяха учудени, когато се

---

[1] Това прилича на казаното вече за частици със спин 1/2 (вж. гл. 4), когато въртяхме координатната система около оста z'; тогава получавахме фазови множители от вида $\exp(\pm i\varphi/2)$. Наистина това е същото, което писахме в гл. 3, § 7 за състоянията $|+>$ и $|->$ за частици със спин 1 и това не е случайно: фотонът е също частица със спин 1, но която няма „нулево състояние".

[2] Ние разбираме, че материалът в този параграф е по-голям и по-труден от това, което се полага за нашето ниво на знания. Затова най-добре ще е да пропуснете този параграф и да преминете направо към § 6. Но ако притежавате достатъчно самолюбие и време, по-късно се върнете към него. Той представлява великолепен пример (при това взет от последните работи по физика на високите енергии) за това какво може да се постигне с помощта на нашата формулировка на квантовомеханична система с две нива.

[3] Частиците, участвуващи в силните взаимодействия, се наричат *адрони* (бел. ред.).

забеляза, че някои процеси, които „трябваше“ да протичат, в действителност не се осъществяват. При някои взаимодействия например не се появяваха определен вид частици, макар и да се очакваха. Гел-Ман и Нишиджима забелязаха, че много от тези странни случаи могат да бъдат обяснени, ако се приеме нов закон за запазване: *запазване на странността*. Те предположиха, че съществува ново свойство, присъщо на всяка частица — число, наречено от тях „странност“, — че при всяко силно взаимодействие „количеството странност“ се запазва.

Да предположим например, че отрицателен K-мезон с висока енергия, да кажем с енергия много GeV., се сблъсква с протон. В резултат могат да се родят много други частици: π-мезони, K-мезони, Λ-мезони, Σ-частици — всеки един от мезоните и барионите, изброени в табл. 2.2 (т. I). Оказва се обаче, че могат да се родят *само определени комбинации*, а други — никога.

Беше известно, че някои закони за запазване се спазват задължително. Първо, винаги се запазват енергията и импулсът: общата енергия и импулсът след взаимодействието трябва да бъдат равни на общата енергия и импулс преди взаимодействието. Второ, съществува закон за запазване на електричния заряд, според който общият заряд на раждащите се частици трябва да бъде равен на общия електричен заряд на взаимодействуващите частици. В нашия пример наистина протичат такива реакции:

$$\begin{aligned} &K^- + p \rightarrow p + K^- + \pi^+ + \pi^- + \pi^0 \\ \text{или}\quad &K^- + p \rightarrow \Sigma^- + \pi^+. \end{aligned} \tag{9.38}$$

И никога поради незапазване на електричния заряд не протичат реакции от вида:

$$\begin{aligned} &K^- + p \rightarrow p + K^- + \pi^+ \\ \text{или}\quad &K^- + p \rightarrow \Lambda^0 + \pi^+. \end{aligned} \tag{9.39}$$

Беше също известно, че *количеството барионни* се запазва: тяхното количество *преди и след* реакцията трябва да бъде едно и също. При това *античастицата* на бариона се брои за *минус* един барион. Това означава, че са позволени—и те наистина се осъществяват — реакции от вида:

$$\begin{aligned} &K^- + p \rightarrow \Lambda^0 + \pi^0 \\ \text{или}\quad &K^- + p \rightarrow p + K^- + p + \bar{p} \end{aligned} \tag{9.40}$$

(където $\bar{p}$ е антипротон, имащ отрицателен електричен заряд). Но ние никога няма да наблюдаваме реакцията

$$\begin{aligned} &K^- + p \rightarrow K^- + \pi^+ + \pi^0 \\ \text{или}\quad &K^- + p \rightarrow p + K^- + n, \end{aligned} \tag{9.41}$$

защото броят на барионите в тези реакции не се запазва.

Тези закони обаче *не обясняват* странния факт на отсъствие на реакции от вида

$$\begin{aligned} &K^- + p \rightarrow p + K^- + K^0, \\ \text{или}\quad &K^- + p \rightarrow p + \pi^-, \\ \text{или}\quad &K^- + p \rightarrow \Lambda^0 + K^0. \end{aligned} \tag{9.42}$$

Обяснението се крие в закона за запазване на странността. На всяка частица се приписва свойството *странност* S' и закон, според който при *силните* взаимодействия пълната странност *преди* взаимодействието трябва да бъде равна на пълната странност *след* взаимодействието. Протонът и антипротонът (p, $\bar{p}$), неутронът и антинеутронът (n, $\bar{n}$) и π-мезоните (π^+, π^-, π^0) имат странност *нула*; K^+ и K^0-мезонът — странност $+1$; K^- и $\bar{K}^0$ (анти— K^0), Λ^0 и Σ-частиците (Σ^+, Σ^0, Σ^-) — странност

-1|; съществуват също частици и със странност $|-2|$ (Ξ-частицата), а може би и други, засега неизвестни — с други странности[1]. В табл. 9.4 са показани странностите на познатите силно взаимодействуващи частици.

Да видим как действува този закон за запазване на странността при някои от нашите реакции. Ако се тръгва от K^- и p, тяхната обща странност е $(-1)+0=-1$. Законът за запазване на странността твърди, че *продуктите* след реакцията трябва да имат обща странност пак -1. Вие виждате, че в реакциите (9.38) и (9.40) това наистина е така, докато в реакцията (9.42) пълната странност от дясната страна на реакцията е *нула*. При тези реакции странността не се запазва и затова те не могат да се осъществяват. Защо? Това никой не знае. Никой не знае повече от това, което сега и вие знаете. Природата действува така — и толкова!

Нека сега да разгледаме следната реакция: π^--мезон пада върху протон. Може да се получи например Λ^0-частица плюс неутрален K-мезон — две неутрални частици. Но кой от неутралните K-мезони ще се получи: K^0 или $\bar{K}^0$? Понеже Λ^0 е със странност -1, а π^- и p^+ са със странност 0, поради закона за запазване на странността при силните взаимодействия, трябва да се роди частица със странност $+1$, следователно това е K^0-мезон. Тази реакция ще изглежда така:

$$\pi^- + p \rightarrow \Lambda^0 + K^0$$

и странността се запазва, понеже

$$S = 0 + 0 = (-1) + (+1).$$

Не е възможно родената частица да бъде $\bar{K}^0$, защото тя е частица със странност -2, а това нарушава баланса за странността в тази реакция. От своя страна, $\bar{K}^0$-мезонът може да се роди в други реакции:

$$n + p \rightarrow n + n + \bar{K}^0 + K^+,$$

където

$$S = 0 + 0 = 0 + 0 + (+1) + (-1),$$

или

$$K^- + p \rightarrow n + \bar{K}^0,$$

където

$$S = (-1) + 0 = 0 + (-1).$$

Вие можете да помислите: „не са ли излишни всички тези разговори? Та *как да различим* K^0 от $\bar{K}^0$? Те са частица и античастица, следователно имат еднакви маси, а електричният им заряд е равен на нула“. Работата е там, че можем да ги различим: по реакциите, които *те* предизвикват! Например $\bar{K}^0$-мезонът може като взаимодействува с протон, да създаде Λ^0-частица в реакция от вида

$$\bar{K}^0 + p \rightarrow \Lambda^0 + \pi^+ ,$$

докато K^0-мезонът *не може* да предизвика такава реакция. За K^0-мезона *не съществува* възможност да създаде Λ^0-частица като взаимодействува с протони и неутрони. Следователно експерименталната разлика между K^0- и $\bar{K}^0$-мезоните е в това, че при[1] взаимодействия с протони едните от тях могат да раждат Λ_0 частици, докато другите — не.

Таблица 9.4

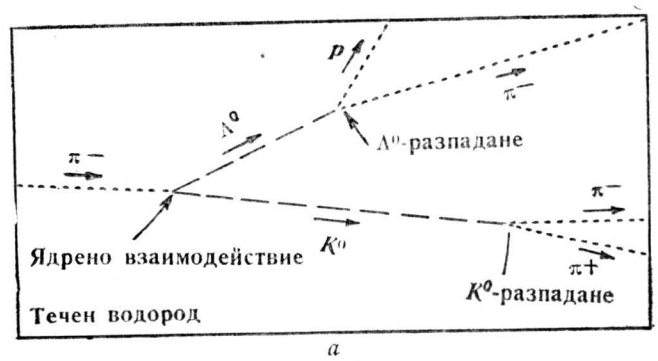
Странност на силно взаимодействуващите частици

	-2	-1	0	$+$
Барион и	Ξ^0 Ξ^-	Σ^+ Λ, Σ^0 Σ^-	p n	
Мезони		$\bar{K}^0$ K^-	π^+ K^+ π^0 K_0 π^-	

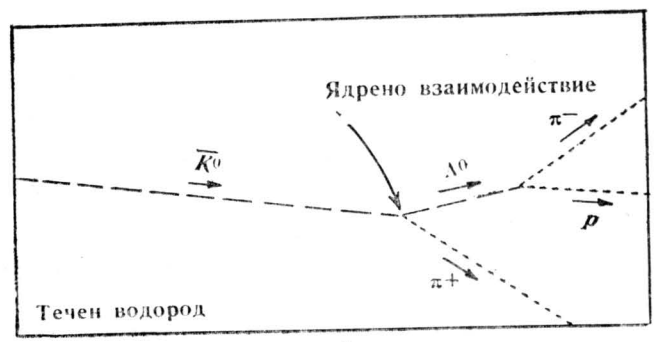
[1] Между новооткритите частици е и барионът Ω^- със странност — 3.

[2] Ако, разбира се, не се създадат *още два* K^+-мезона или някакви други частици с обща странност $+2$. Тук трябва да считаме, че става дума за реакции, при които енергията е недостатъчна за раждане на тези добавъчни странни частици.

Тогава едно от предсказанията на теорията за запазване на странността би могло да бъде следното: ако в опит с пиони с висока енергия Λ-частиците се раждат заедно с неутрален K-мезони, тогава *този* неутрален K-мезон, попадайки върху други p или n, не би могъл да създаде нови Λ-частици. Опитът би могъл да се проведе по следния начин: насочва се сноп от π^--мезгни в голяма водородна мехурчеста камера; следата на π^--мезона изчезва, но някъде встрани се появяват двойка следи (p и π^0), от разпадането на Λ-частица[1] (фиг. 9.5). Тогава можете да бъдете сигурни, че някъде наблизо се е родил K^0-мезон, който, ръзбира се, не може да остави следи в камерата.



а



б

Фиг. 9.5. Високоенергетични събития, наблюдавани във водородна мехурчеста камера.
а — π^--мезон взаимодейства с водородно ядро (протон), образувайки Λ^0-частица и K^0-мезон; двете частици се разпадат в камерата; *б* — $\bar{K}^0$-мезон взаимодейства с протон образува π^--мезон и Λ^0-частица, която след това се разпада. (Неутралните частици не оставят следи в камерата. Предполагаемите им траектории са показани на чертежите с пунктирани линии.)

Но вие можете да намерите неговата посока, като приложите законите за запазване на енергията и импулса. (А понякога самият той разкрива местоположението си, разпадайки се на двойка заредени частици, както това е показано на фиг. 9.5,*а*.) Когато K^0-мезонът се движи в камерата, той може да взаимодейства с някое водородно ядро (протон), създавайки при това някои други частици. Хипотезата за запазване на странността предсказва, че *никога* K^0-мезон не може да породи Λ-частица в реакция от вида

$$K^0 + p \rightarrow \Lambda^0 + \pi^+,$$

докато $\bar{K}^0$ може да породи такава реакция. С други думи, в мехурчестата камера K^0-мезонът може да предизвика събитие, подобно на показаното на фиг. 9.5,*б*, където Λ^0-частицата може да бъде забелязана благодарение на разпада си. Това е първата част на разказа, именно запазването на странността.

Всъщност странността *не* се запазва *напълно*. Тя се запазва само при силните взаимодействия, докато при т. нар. „слаби взаимодействия" — бавни процеси на разпадане на частиците с времена от порядъка на 10^{-10} s (типичното време за силните взаимодействия е от порядъка на 10^{-23} s), странността *не* се за-

[1] Свободна Λ-частица се разпада бавно, чрез слабо взаимодействие (при което странността не се запазва). Продуктите от това разпадане могат да бъдат p и π^- или n и π^0. Времето на живот е $2{,}2 \cdot 10^{-10}$ s.

пазва. K^0-мезонът например се разпада на двойка π-мезони (+ и −) за време 10^{-10} s. Именно така бяха забелязани за пръв път K-частиците. Обърнете внимание, че реакцията на разпад

$$K^0 \to \pi^+ + \pi^-$$

не запазва странността, така че подобен процес не може да се извърши „бързо“ чрез силно взаимодействие. Тази реакция е възможно да се извърши само чрез слабо взаимодействие.

Но $\overline{K^0}$-мезонът се разпада *по същия начин* (на π^+ и π^-) и със същото време на живот

$$\overline{K^0} \to \pi^- + \pi^+.$$

Това е пак процес на слабо взаимодействие и затова странността не се запазва. Съществува принцип, според който за всяка реакция може да се намери съответна реакция, в която „материята“ е заменена с „антиматерия“ и обратно. Тогава щом $\overline{K^0}$ е античастица на K^0-мезона, той трябва да се разпадне на античастиците на π^+ и π^--мезоните, но античастицата на π^+ е π^- и обратно (т. е. за π^--мезоните няма значение кой от тях ще бъде наречен „материя“ и кой — „антиматерия“). И така вследствие на слабите взаимодействия K^0 и $\overline{K^0}$-мезоните могат да се превръщат в еднакви крайни продукти. Ако те се идентифицират по техните разпадания (в мехурчеста камера), те изглеждат напълно еднакви и са неразличими. Тези две частици могат да бъдат различени само по техните силни взаимодействия.

Най-сетне достигнахме до работата на Гел-Ман и Пайс. Първо те забелязаха, че щом K^0 и $\overline{K^0}$-мезоните могат да се превръщат в два π-мезона, трябва да съществува *някаква амплитуда* за това, K^0 да се превръща в $\overline{K^0}$, както и обратното. Подобно на химиците, можем да запишем тази реакция така:

$$K^0 \rightleftarrows \pi^+ + \pi^- \rightleftarrows \overline{K^0}. \tag{9.43}$$

От съществуването на такава реакция следва, че съществува амплитуда, която ще означаваме с $-\frac{i}{\hbar}\langle \overline{K^0} \mid W \mid K^0\rangle$ за превръщане на K^0 в $\overline{K^0}$, която се обуславя от слабите взаимодействия, с които е свързано и разпадането на тези частици на два π-мезона. Ясно е, че съществува амплитуда и за обратния процес $\langle K^0 \mid W \mid \overline{K_0}\rangle$. Понеже материята и антиматерията имат еднакво поведение, тези две амплитуди трябва да са числено равни помежду си; да ги означим с A:

$$\langle K^0 \mid W \mid K^0\rangle = \langle K^0 \mid W \mid \overline{K^0}\rangle = A. \tag{9.44}$$

И ето, казват Гел-Ман и Пайс, тук възниква интересно положение. Това, което досега е било считано за две различни състояния на микросвета (K^0 и $\overline{K^0}$), в действителност трябва да се разглежда като *една система* с две състояния, понеже съществува амплитуда за преход между тях. За пълнота на разсъжденията би следвало да се разглеждат не две състояния, а повече, защото съществуват още и състоянията 2π и др.; но понеже става дума главно за връзката между K^0 и $\overline{K^0}$, засега да не усложняваме положението и нека разглеждаме само система с две състояния. Другите състояния ще бъдат *вземани пред вид* дотолкова, доколкото тяхното съществуване се отразява върху амплитудите за преход между K^0 и $\overline{K^0}$ (9.44).

В съответствие с всичко това Гел-Ман и Пайс анализираха неутралната частица като система с две състояния. Те започнаха с това, че избраха състоянията $|K^0\rangle$ и $|\overline{K^0}\rangle$ за базисни. (Оттук нататък нещата стават подобни на случая с амонячната молекула.) Всяко събитие $|\psi\rangle$ на неутралния K-мезон може да се опише чрез задаване на амплитудите, показващи в кое от базисните състояния се намира той. Да означим тези амплитуди

$$C_+ = \langle K^0 \mid \psi \rangle \quad \text{и} \quad C_- = \langle \overline{K^0} \mid \psi \rangle. \tag{9.45}$$

Следващата крачка трябва да бъде написването на хамилтоновото уравнение за такава система с две състояния. Ако K^0 и $\overline{K^0}$ не бяха свързани помежду си, уравненията биха били много прости

$$i\hbar \frac{dC_+}{dt} = E_0 C_+; \quad i\hbar \frac{dC_-}{dt} = E_0 C_-. \tag{9.46}$$

Но съществува още и амплитудата $\langle \overline{K^0} \mid W \mid K^0 \rangle$ за прехода на K^0 в $\overline{K^0}$; затова към дясната част на първото уравнение трябва да добавим събираемото

$$\langle \overline{K^0} \mid W \mid K^0 \rangle C_- = AC_-.$$

Аналогичното събираемо AC_+ трябва да се добави и във второто уравнение, определящо изменението на C_-. Но това още не е всичко! Щом отчитаме двупионния ефект, то трябва да отчетем и съществуването на *допълнителна* амплитуда за превръщане на K^0 мезона *сам в себе си* посредством канала

$$K^0 \to \pi^- + \pi^+ \to K^0.$$

Тази допълнителна амплитуда (да я означим с $\langle K^0 \mid W \mid K^0 \rangle$) е точно равна на амплитудата $\langle \overline{K^0} \mid W \mid K^0 \rangle$, понеже амплитудите за преход от двойка π-мезони в K^0 или $\overline{K^0}$ са едни и същи.

Ако искате, това може да се покаже и по-подробно. Нека напишем[1]

$$\langle \overline{K^0} \mid W \mid K^0 \rangle = \langle \overline{K^0} \mid W \mid 2\pi \rangle \langle 2\pi \mid W \mid K^0 \rangle$$

и

$$\langle K^0 \mid W \mid K^0 \rangle = \langle K^0 \mid W \mid 2\pi \rangle \langle 2\pi \mid W \mid K^0 \rangle.$$

Симетрията между материята и антиматерията изисква

$$\langle 2\pi \mid W \mid K^0 \rangle = \langle 2\pi \mid W \mid K^0 \rangle,$$

а също и

$$\langle K^0 \mid W \mid 2\pi \rangle = \langle \overline{K^0} \mid W \mid 2\pi \rangle.$$

Оттук

$$\langle K^0 \mid W \mid K^0 \rangle = \langle \overline{K^0} \mid W \mid K^0 \rangle,$$

и също и

$$\langle \overline{K^0} \mid W \mid K^0 \rangle = \langle K^0 \mid W \mid K^0 \rangle,$$

което искахме да покажем.

И така имаме две допълнителни амплитуди $\langle K^0 \mid W \mid K^0 \rangle$ и $\langle \overline{K^0} \mid W \mid \overline{K^0} \rangle$ и двете равни на A, които трябва да поставим в уравнението на Хамилтон: първата от тях води до член AC_+ в дясната част уравнението за $\frac{dC_+}{dt}$, а другата — до член AC_- в дясната част на уравнението за $\frac{dC_-}{dt}$. С помощта на такива разсъждения Гел-Ман и Пайс достигат до заключението, че уравненията на Хамилтон за системата $K^0\overline{K^0}$ трябва да имат вида:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dC_+}{dt} &= E_0 C_+ + AC_- + AC_+, \\ i\hbar \frac{dC_-}{dt} &= E_0 C_- + AC_+ + AC_-. \end{aligned} \tag{9.47}$$

[1] Тук ние опростяваме. Системата от 2π-мезона има множество състояния, отговарящи на различните импулси на π-мезоните, и в дясната част на това равенство би трябвало да поставим сума по всички базисни състояния на π-мезоните. Но и тогава се достига до същия резултат.

Сега трябва да направим една поправка към казаното в предишните глави, че две такива амплитуди като $\langle K^0 \mid W \mid \overline{K^0}\rangle$ и $\langle \overline{K^0} \mid W \mid K^0\rangle$, изразяващи обратни един на друг преходи, винаги са комплексно спрегнати. Това е вярно, ако говорим за частици, които не се разпадат. Но ако частиците могат да се разпадат, и следователно да „изчезват", такива амплитуди не трябва да бъдат задължително комплексно спрегнати. Следователно равенството (9.44) *не означава*, че нашите амплитуди са реални числа. Всъщност те са комплексни числа. Така че коефициентът A е комплексно число и не може да бъде просто прибавен към енергията E_0.

Понеже много пъти бяха имали работа с електрони и техните спинове, Гел-Ман и Пайс знаеха, че подобни уравнения означават, че съществува и *друга* двойка базисни състояния с особенопростви, които също са удобни за представяне на системата K-мезоани. Те разсъждаваха така: „Да вземем сега сумата и разликата на тези две уравнения. Енергията ще отчитаме от E_0 и ще използуваме такава система единици, в която $\hbar=1$". (Сега така постъпват всички теоретици. Разбира се, това не изменя физиката, но уравненията изглеждат по-прости.) В резултат те получават

$$\begin{aligned} i\frac{d}{dt}(C_+ + C_-) &= 2A(C_+ + C_-), \\ i\frac{d}{dt}(C_+ - C_-) &= 0, \end{aligned} \tag{9.48}$$

откъдето е ясно, че комбинациите на амплитудите $C_+ + C_-$ и $C_+ - C_-$ действуват независимо една от друга (и отговарят на стационарните състояния, които изучавахме по-рано.) Двамата физици сметнаха, че по-удобно би било да се употребява за K частиците друго представяне. Те определиха състоянията

$$\begin{aligned} \mid K_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mid K^0\rangle + \mid \overline{K^0}\rangle), \\ \mid K_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\mid K^0\rangle - \mid \overline{K^0}\rangle) \end{aligned} \tag{9.49}$$

и решиха, че вместо да мислят за K^0 и $\overline{K^0}$-мезоните, със същия успех могат да разглеждат „частиците" (т. е. „състоянията") K_1 и K_2. (Разбира се, тези състояния съответствуват на получените от нас по-рано състояния $\mid I\rangle$ и $\mid II\rangle$. Ние няма да използуваме старите означения, защото искаме да употребяваме означенията на самите автори, възприети в цялата физична литература по този въпрос.)

Но Гел-Ман и Пайс направиха всичко това не с цел да дадат на частиците нови имена; в него има и някаква доста странна физика. Нека C_1 и C_2 са амплитудите за това някакво състояние $\mid \psi\rangle$ да бъде или K_1-, или K_2-мезон:

$$C_1 = \langle K_1 \mid \psi\rangle, \qquad C_2 = \langle K_2 \mid \psi\rangle.$$

От уравнения (9.49) получаваме

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(C_+ + C_-), \quad C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(C_+ - C_-). \tag{9.50}$$

Тогава (9.48) се превръща в

$$i\frac{dC_1}{dt} = 2AC_1, \quad i\frac{dC_2}{dt} = 0. \tag{9.51}$$

Техните решения имат вида:

$$C_1(t) = C_1(0)\,e^{-i2At}, \quad C_2(t) = C_2(0), \tag{9.52}$$

където $C_1(0)$ и $C_2(0)$ са амплитудите при $t=0$.

Тези уравнения показват, че ако неутралният K-мезон при $t=0$ се намира в състояние $\mid K_1\rangle$ (така че $C_1(0)=1$ и $C_2(0)=0$),

то амплитудите в момент t ще бъдат

$$C_1(t) = e^{-i2At}, \qquad C_2(t) = 0.$$

Като си припомним, че A е комплексно число, удобно е да положим

$$2A = \alpha - i\beta$$

(понеже имагинерната част на $2A$ се оказва отрицателна, ще я записваме *минус* $i\beta$). След такава постановка $C_1(t)$ ще добие вида

$$C_1(t) = C_2(0)\, e^{-\beta t}\, e^{-i\alpha t}. \tag{9.53}$$

Вероятността да се забележи K_1-мезон в момента t е равна на модула на тази амплитуда, т. е. $e^{-2\beta t}$. А от (9.52) следва, че вероятността да се забележи състоянието K_2 в който и да е момент е нула. Това означава, че ако създадете K-мезон в състояние $|K_1>$, то *вероятността да го намерите* намалява експоненциално с времето, но в състояние $|K_2>$ никога няма да го видите. Тогава къде пропада той? Той се разпада на два π-мезона със средно време на живот $\tau = \frac{1}{2\beta}$, което, определено експериментално, се оказва, че е равно на 10^{-10} s.

От друга страна, от (9.52) следва, че ако създадете K-мезон в състояние K_2, той остава в него завинаги. В действителност това не е така. В опитите е било забелязано, че той се разпада на *три* π-мезона, но 600 пъти по-бавно в сравнение с двупионния разпад. Това означава, че в изходния хамилтониан съществуват други по-малки членове, които сме пренебрегнали. Докато разглеждаме обаче двупионни разпадания K_2 е „вечен".

Разказът за Гел-Ман и Пайс наближава своя край. Остава само да разгледаме какво става, когато *при силно взаимодействие заедно с* Λ^0*-частицата се образува и* K*-мезон*. Понеже неговата странност е $+1$, то той трябва да възникне в състояние K^0. Следователно при $t=0$, той не е нито K_1, нито K_2, а тяхна *смес*. Началните условия са:

$$C_+(0) = 1, \quad C_-(0) = 0.$$

Но това означава, че

$$C_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \qquad C_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

а от (9.52) следва, че

$$C_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\, e^{-\beta t}\, e^{-i\alpha t}, \quad C_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{9.54}$$

Нека сега си спомним, че K_1 и K_2 са линейни комбинации на K^0 и $\bar{K}^0$. В (9.54) амплитудите бяха избрани така, че при $t=0$ частите, от които се състои $\bar{K}^0$, взаимно се унищожаваха поради интерференцията и оставаше само състоянието K^0. Но състоянието $|K_1>$ *не се мени с времето*, а състоянието $|K_2>$ го няма изобщо. След началния момент интерференцията между C_1 и C_2 води до крайни амплитуди и за K^0 и за $\bar{K}^0$.

Какво означава всичко това? Да се върнем малко назад и да помислим върху опита, показан на фиг. 9.5. Там π-мезонът е образувал Λ^0-частица и K^0-мезон, който лети през водородната камера. Когато той се движи, съществува малка, но все пак крайна вероятност да се срещне с водородно ядро. По-рано мислехме, че законът за запазване на странността ще попречи на K-мезона да образува Λ^0-частица при такова взаимодействие. Сега обаче вече разбираме, че това не е така. Въпреки че *първоначално* нашият K-мезон е бил K^0-мезон, неспособен да породи Λ^0-частица, той *не остава* такъв непрекъснато. След кратък миг се появява *някаква амплитуда*, той да премине в състояние $\bar{K}^0$. Следователно трябва да се очаква, че ще видим появяването на Λ^0-час-

тица, образувана по траекторията на K-мезона. Вероятността за подобно събитие се дава от амплитудата C_-, която може да се изрази чрез C_1 и C_2. Връзката е следната

$$C_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(C_1 - C_2) = \frac{1}{2}(e^{-\beta t} e^{-i\alpha t} - 1). \qquad (9.55)$$

А когато K-частицата се движи, вероятността тя да се „прояви" като $\bar{K}^0$ ще бъде равна на $|C_-|^2$, т. е.

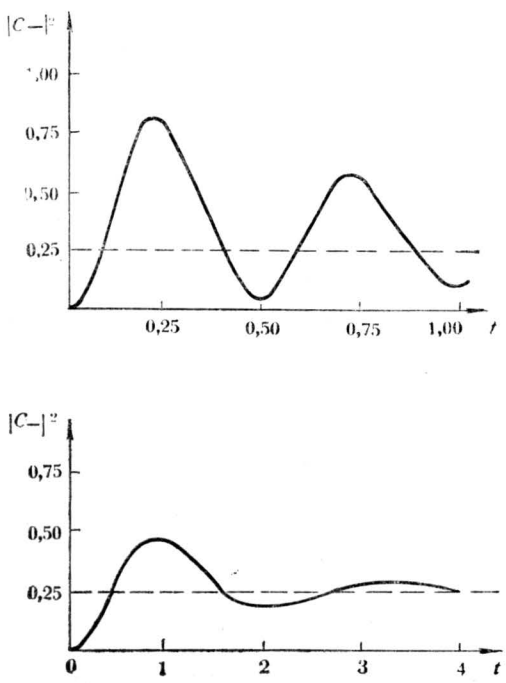
$$|C_-|^2 = \frac{1}{4}(1 + e^{-2\beta t} - 2e^{-\beta t}\cos\alpha t). \qquad (9.56)$$

Сложен и поразителен резултат!

Това е забележителното предсказване на Гел-Ман и Пайс: когато възниква K-мезон, вероятността той да се превърне в $\bar{K}^0$-мезон, потвърждавайки това чрез създаване на Λ^0-частица, се изменя с времето по закона (9.56). Както сами виждате, това предсказване следва само от чисто логични разсъждения въз основа на общите принципи на квантовата механика, без привличане на каквито и да било подробности за вътрешните механизми и процесите в K-мезоните. И понеже никой не знае нищо повече за тези вътрешни механизми, то и Гел-Ман и Пайс не можаха да се придвижат по-далеч. Те не можаха по теоретичен път да изчислят стойностите на α и β. Това не е направено и до ден днешен. По силите им беше да оценят стойността на β от експериментално наблюдаваната скорост на разпада на два K^0-мезона ($2\beta = 1{,}1 \cdot 10^{10}\ s^{-1}$), но за α те не можеха да кажат нищо.

На фиг. 9.6 сме показали функцията (9.56) за две стойности на α. Вижда се, че нейната форма зависи силно от отношението α/β. Отначало не съществува никаква вероятност да се наблюдава K-мезона, а след това такава се появява. Ако стойността на α е голяма, вероятността осцилира силно; ако стойността на α е малка, осцилациите са малки или въобще липсват и тогава вероятността бавно нараства до 1/4.

Обикновено K-мезонът се движи с постоянна скорост, близка до тази на светлината. Тогава кривите на фиг. 9.6 представят вероятността за наблюдаване на $\bar{K}^0$-мезона по продължение на следата с типична за нея дължина от порядъка на няколко сан-



б

Фиг. 9.6. Функцията (9.56)
а — за $\alpha = 8\pi\beta$; *б* — за $\alpha = 2\pi\beta$ ($2\beta = 10^{10}\ s^{-1}$); времето t е нанесено в 10^{-10}s

тиметра. Сега можете да разберете защо това предсказание е така своеобразно и удивително. По начало имате само една частица и тя или се разпада, или се превръща в друга частица. Вероятността за такъв ефект по време на движението се мени много странно. В природата не съществува нищо друго, подобно на това. И това предсказване е направено само въз основа на разсъждения за интерференции на амплитудите на вероятност.

Ако някъде съществува известна вероятност да се проверят основните принципи на квантовата механика по най-пряк начин — става ли суперпозиция на амплитудите или не — то това е именно тук. Независимо че този ефект беше предсказан преди няколко години, досега все още не съществува достатъчно ясно опитно изследване. Съществуват няколко по-груби резултати, които дават указание, че $\alpha \neq 0$ и следователно този ефект в действителност се наблюдава; по-точно, те показват, че α е от порядъка на β. Това е всичко, което знаем от експеримента. Би било чудесно, ако успеем точно да проверим и установим наистина ли е в сила принципа на суперпозиция в този тайнствен свят на странните частици — с техния неопределен повод за разпадане и неизвестна причина за съществуване на странността.[1]

Проведеният току-що анализ представлява характерен пример за това как в днешно време се използува квантовата механика, за разгадаване тайните на странните частици. Във всички нови и сложни теории, за които вие може би сте чували, няма нищо повече от този елементарен фокус, използуващ принципа на суперпозицията и други основни принципи на квантовата механика. Някои твърдят, че имат теория, с помощта на която могат да изчислят α и β или поне α при дадено β. Но тези теории са съвършено безполезни. Например теорията, предсказваща стойността на α при дадено β, показва, че α трябва да бъде безкрайно голямо. Системата уравнения, от които те тръгват, включва два π-мезона и след това от тях се възвръщат към K^0-мезона и т. н. Като се направят всички пресмятания, наистина възникват две уравнения, подобни на получените от нас, но понеже двата пиона имат безкрайно много състояния, зависещи от техните импулси, интегрирането по тях води до α, равно на безкрайност. А природното α *не е* безкрайно. Следователно динамичните теории са неверни. Наистина извънредно поразително е, че *единствените* явления, които могат да бъдат предсказани в света на странните частици са основани на принципите на квантовата механика на онова ниво до което сте достигнали и вие сега.

9-6. Обобщение за системи с N състояния

Ние разказахме всичко, което желаехме, за системи с две състояния. В следващите глави ще преминем към изучаване на системи с много състояния. Разпространението на идеите, разработени при системи с две състояния, върху системи с N състояния става много лесно.

Ако системата притежава N различни състояния, всяко състояние $|\psi(t)>$ може да бъде представено като линейна комбинация на произволна съвкупност от базисни състояния, където $|i>=1, 2, \ldots N$

$$|\psi(t)> = \sum_i |i> C_i(t) . \qquad (9.57)$$

Коефициентите $C_i(t)$ представляват амплитудите $<i|\psi(t)>$. Поведението на амплитудите C_i с времето се описва от уравнението

---

[1] Такава интерференция действително е била наблюдавана: Коефициентът α се оказва равен на $-0{,}96\,\beta$. Оттук може да се изчисли и разликата между масите на K_1 и K_2 -мезоните, която се оказва $-0{,}35 \cdot 10^{-5}$ eV. Това е най-малката разлика между маси на частици, известна засега във физиката. (бел. ред. на руското издание)

$$i\hbar \frac{dC_i(t)}{dt} = \sum_j H_{ij} C_j, \tag{9.58}$$

където енергетичната матрица H_{ij} описва физиката на процеса. По вид тя е такава, каквато и за система с две състояния. Но сега i и j трябва да вземат всички N базисни стойности и енергетичната матрица H ще бъде от $N \times N$, т. е. N^2 числа. Както и по-рано $H_{ij} = H_{ji}$ (дотогава, докато е в сила закона за запазване броя на частиците) и диагоналните елементи H_{ii} са реални числа.

Определихме общото решение за всички C за системи с две състояния, когато енергетичната матрица е постоянна (не зависи, от времето). По същия начин не е трудно да се реши и уравнение (9.58) за система с N състояния, когато H не зависи от времето. Пак започваме с това, че търсим възможните решения, при които всички амплитуди зависят от времето по *един и същ* начин. Да опитаме

$$C_i = a_i e^{-(i/\hbar)Et}. \tag{9.59}$$

Ако всички тези C_i поставим в (9.58), производните $\frac{dC_i(t)}{dt}$ се превръщат в $(-i/\hbar)EC_i$. Съкращавайки навсякъде общата експонента, получаваме

$$E a_i = \sum_j H_{ij} a_j. \tag{9.60}$$

Това представлява система от N линейни алгебрични уравнения за N неизвестни $a_1, a_2, \ldots, a_n$, такава система има решение, ако ни провърви и се окаже, че детерминантата от коефициентите пред a е равна на нула. Не е необходимо обаче много да се умува: трябва просто да започнете да решавате тази система по някакъв начин и веднага ще забележите, че тя може да се реши само при някои стойности на E (спомнете си, че единствената величина, която подлежи на определяне в тези уравнения, е E).

Ако пък искате всичко да бъде както трябва, препишете (9.60) така:

$$\sum_j (H_{ij} - \delta_{ij} E) a_j = 0. \tag{9.61}$$

След това приложете правилото (ако го знаете), че тези уравнения ще имат решение за онези стойности на E, за които

$$\mathrm{Det}(H_{ij} - \delta_{ij} E) = 0. \tag{9.62}$$

Всеки член в детерминантата е просто H_{ij}; като само от диагоналните елементи е извадено E. С други думи, (9.62) означава

$$\begin{vmatrix} H_{11}-E & H_{12} & H_{13} \ldots \\ H_{21} & H_{22}-E & H_{23} \ldots \\ H_{31} & H_{32} & H_{33}-E \ldots \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{vmatrix} = 0 \tag{9.63}$$

Разбира се, това е само друг начин за записване на алгебричното уравнение за E, като е извършено сумиране и умножение в определен ред. Тези произведения дават всички степени на E до E^N.

И така имаме многочлен от N-та степен, равен на нула. Той има, изобщо казано, N корена. (Трябва да се помни обаче, че някои от тях могат да бъдат кратни, т. е. два или повече от корените да бъдат равни помежду си.) Да означим тези N корена така:

$$E_I, E_{II}, E_{III}, \ldots, E_n, \ldots, E_N \tag{9.64}$$

(нека n означава n-тото поредно число, така че n приема стойностите $I, II, \ldots, N$). Някои от тези енергии могат да бъдат равни помежду си, например $E_{II} = E_{III}$, но ние сме решили да ги означаваме различно.

Уравнения (9.60) или (9.61) имат по едно решение за всяка стойност на E (от (9.60)). Ако поставим в (9.60) кое да е E, например E_n и намерите всички a_i, ще се получи редица от числа a_i, отнасящи се за енергията E_n. Тази редица ще означим с $a_i(\mathbf{n})$.

Ако се поставят тези $a_i(\mathbf{n})$ в (9.59), се получават амплитудите $C_i(\mathbf{n})$ за това, състоянията с определена енергия да се намират в базисно състояние $|i>$. Нека $|\mathbf{n}>$ да означава векторът на състояние с определена енергия при $t=0$. Тогава може да се напише

$$C_i(\mathbf{n}) = <i \mid \mathbf{n}> e^{(i/\hbar)E_n t}, \tag{9.65}$$

където

$$<i \mid \mathbf{n}> = a_i(\mathbf{n}).$$

Пълното състояние с определена енергия $|\psi_n(t)>$ може да бъде записано така:

$$|\psi_n(t)> = \sum_i |i> a_i(\mathbf{n}) e^{-(i/\hbar)E_n t}$$

или

$$|\psi_n(t)> = |\mathbf{n}> e^{-(i/\hbar)E_n t}. \tag{9.66}$$

Векторите на състоянията $|\mathbf{n}>$ описват конфигурацията на състоянията с определена енергия, но с изнесена зависимост от времето. Това са постоянни вектори, които, ако искаме, можем да използуваме за нова базисна съвкупност.

Всяко от състоянията $|\mathbf{n}>$ притежава това свойство (в което може лесно да се убедите сами), че под действие на оператора на Хамилтон $\hat{H}$, се получава просто E_n, умножено на същото състояние, т. е.

$$\hat{H} |\mathbf{n}> = E_n |\mathbf{n}>. \tag{9.67}$$

Следователно енергията E_n е характеристично число за оператора на Хамилтон $\hat{H}$. Както видяхме по-рано, в общия случай хамилтонианът притежава няколко характеристични енергии. Обикновено физиците ги наричат „собствени стойности“ на матрицата $\hat{H}$. За всяка собствена стойност на $\hat{H}$, с други думи за всяка енергия, съществува състояние с определена енергия, което ще назовем „стационарно“. Състоянията $|\mathbf{n}>$ обикновено се наричат „собствени състояния на $\hat{H}$“. На всяко собствено състояние отговаря собствена стойност E_n.

По-нататък състоянията $|\mathbf{n}>$ (те са N на брой) могат, изобщо казано, също да бъдат избрани като базисни състояния. За тази цел всички те трябва да бъдат ортогонални, в смисъл, че за всяка двойка от тях, да кажем $|\mathbf{n}>$ и $|\mathbf{m}>$, да бъде в сила

$$<\mathbf{n} \mid \mathbf{m}> = 0. \tag{9.68}$$

Ако всички енергии са различни, това автоматично се изпълнява. Освен това може всички $a_i(\mathbf{n})$ да се умножат с постоянен множител, така че всички състояния да бъдат ортонормирани

$$<\mathbf{n} \mid \mathbf{n}> = 1. \tag{9.69}$$

Когато се окаже, че (9.63) случайно има два или повече еднакви корена с една и съща енергия, то се появяват неголеми усложнения. Както и по-рано, имаме две различни съвкупности a_i, отговарящи на две еднакви енергии, но състоянията, които те дават, не са непременно ортогонални. Нека сме направили всички необходими процедури и сме установили, че има две стационарни състояния с равни енергии. Да ги означим с $|\mu>$ и $|\nu>$. Тогава не е задължително те да са ортогонални; ако не ви е провървяло, ще се окаже, че

$$<\mu \mid \nu> \neq 0.$$

Но за сметка на това се оказва, че винаги могат да се построят

две нови състояния (да ги означим с $|\mu'\rangle$ и $|\nu'\rangle$) със същите енергии, но ортогонални помежду си:

$$\langle\mu'|\nu'\rangle=0. \tag{9.70}$$

Това може да се постигне, съставяйки линейна комбинация от $|\mu\rangle$ и $|\nu\rangle$ с така подбрани коефициенти, че да бъде изпълнено (9.70). Винаги е полезно да се направи това и по-нататък ще предполагаме, че това винаги е направено, така че нашите енергетични състояния $|\mathbf{n}\rangle$ са ортогонални помежду си.

Нека от любопитство да докажем, че когато две стационарни състояния притежават различни енергии, те наистина са ортогонални. За състоянието $|\mathbf{n}\rangle$ с енергия $E_\mathbf{n}$ имаме

$$\hat{H}|\mathbf{n}\rangle=E_\mathbf{n}|\mathbf{n}\rangle. \tag{9.71}$$

Това операторно уравнение означава, че имаме някакво съотношение между числа. Ако попълним липсващите части, това уравнение ще означава същото, което и

$$\sum_i\langle i|H|j\rangle\langle j|\mathbf{n}\rangle=E_\mathbf{n}\langle i|\mathbf{n}\rangle. \tag{9.72}$$

Комплексно спрегнатото му уравнение ще бъде

$$\sum_i\langle i|\hat{H}|j\rangle^*\langle j|\mathbf{n}\rangle^*=E_\mathbf{n}{}^*\langle i|\mathbf{n}\rangle^*. \tag{9.73}$$

Нека сега си спомним, че комплексното спрягане на амплитудите — това е амплитудата за обратния процес, така че (9.73) може да се препише във вида:

$$\sum_i\langle\mathbf{n}|j\rangle\langle j|\hat{H}|i\rangle=E_\mathbf{n}{}^*\langle\mathbf{n}|i\rangle. \tag{9.74}$$

Понеже това уравнение е вярно за *всяко* i, то може да се съкрати до вида:

$$\langle\mathbf{n}|\hat{H}=E_\mathbf{n}{}^*\langle\mathbf{n}|. \tag{9.75}$$

Това уравнение се нарича *спрегнато* на (9.71).

Сега вече е лесно да се докаже, че $E_\mathbf{n}$ е реално число. Да умножим (9.71) с $\langle\mathbf{n}|$. Получаваме

$$\langle\mathbf{n}|\hat{H}|\mathbf{n}\rangle=E_\mathbf{n}, \tag{9.76}$$

(като се вземе пред вид, че $\langle\mathbf{n}|\mathbf{n}\rangle=1$). Да умножим сега (9.75) отдясно на $|\mathbf{n}\rangle$:

$$\langle\mathbf{n}|\hat{H}|\mathbf{n}\rangle=E_\mathbf{n}{}^*. \tag{9.77}$$

Сравнявайки (9.76) с (9.77), виждаме, че

$$E_\mathbf{n}=E_\mathbf{n}{}^*, \tag{9.78}$$

а това означава, че $E_\mathbf{n}$ е реално число. Така че звездичката над $E_\mathbf{n}$ може вече да не се поставя.

Сега вече сме готови да докажем, че състояния с различни енергии са ортогонални. Нека $|\mathbf{n}\rangle$ и $|\mathbf{m}\rangle$ да са базисни състояния с определени енергии. Написваме (9.75) за състоянието $|\mathbf{m}\rangle$ и го умножаваме с $|\mathbf{n}\rangle$, получаваме:

$$\langle\mathbf{m}|\hat{H}|\mathbf{n}\rangle=E_\mathbf{m}\langle\mathbf{m}|\mathbf{n}\rangle.$$

Но ако умножим (9.71) с $\langle\mathbf{m}|$, ще получим

$$\langle\mathbf{m}|\hat{H}|\mathbf{n}\rangle=E_\mathbf{n}\langle\mathbf{m}|\mathbf{n}\rangle.$$

Щом левите части на тези уравнения са равни, равни са и десните

$$E_\mathbf{m}\langle\mathbf{m}|\mathbf{n}\rangle=E_\mathbf{n}\langle\mathbf{m}|\mathbf{n}\rangle. \tag{9.79}$$

Ако $E_\mathbf{m}=E_\mathbf{n}$, това равенство не ни говори нищо. Но ако енергиите на двете състояния $|\mathbf{m}\rangle$ и $|\mathbf{n}\rangle$ *са различни* ($E_\mathbf{m}\neq E_\mathbf{n}$), уравнение (9.79) показва, че $\langle\mathbf{m}|\mathbf{n}\rangle$ трябва да бъде равно на нула, което и искахме да докажем.

10

Свръхфино разцепване във водорода

10-1. Базисни състояния за системи от две частици със спин 1|2

10-2. Хамилтониан на основното състояние на водорода

10-3. Енергетични нива

10-4. Зееманово разцепване

10-5. Състояния в магнитно поле

10-6. Проекционна матрица за спин 1

10-1. Базисни състояния за системи от две частици със спин 1|2

В тази глава ще се запознаем със „свръхфиното разцепване" на водородните нива, илюстриращо интересните възможности, които ни открива квантовата механика. Тук ще имаме работа не с две състояния, а с повече. Поучителното в този пример са методите на квантовата механика, приложени сега за по-сложни системи. Сам по себе си този пример е достатъчно сложен и ако го разберете, веднага ще ви стане ясно как да прилагате използуваните методи в други задачи.

Както е известно, водородният атом се състои от електрон и протон; електронът може да съществува в много дискретни енергетични състояния, във всяко от които неговото движение е различно. Така първото възбудено състояние лежи на 3/4 ридберга, т. е. на 10 eV по-високо от основното. Но даже т. нар. основно състояние не е единствено, понеже електронът и протонът притежават спин. Точно техните спинове обуславят „свръхфината структура" в енергетичните нива, всяко от който се разцепва на няколко почти еднакви нива.

Спинът на електрона може да бъде насочен или нагоре, или надолу; протонът също притежава *собствен* спин, насочен надолу или нагоре. Затова на всяко динамично състояние на атома отговарят *четири* възможни спинови състояния. С други думи, когато физик говори за „основно състояние" на водорода, той в действителност има пред вид „четири основни състояния, а не само най-ниското от тях. За четирите спинови състояния енергията не е съвсем еднаква; съществуват малки отмествания в сравнение с това, което би се наблюдавало, ако липсваха спиновете. Тези отмествания обаче са много по-малки, отколкото онези 10 eV, които лежат между основното състояние и следващото по-високо енергетично ниво. В резултат енергията на всяко динамично състояние се разцепва на ред много тесни енергетични нива — и това е т. нар. *свръхфино разцепване*.

Разликата между енергията на тези четири спинови състояния е това, което искаме да изчислим в тази глава. Свръхфиното разцепване се предизвиква от взаимодействието на магнитните моменти на електрона и протона; то предизвиква малки различия в магнитните енергии на спиновите състояния. Тези различия представляват само около една десетмилионна част от електронволта, което наистина е много по-малко от 10 eV.

Именно поради големия интервал между основното състояние и по-високите нива ние сме в правото си да считаме основното състояние на водорода за „система с четири нива", без да се грижим за това, че при по-високите енергии състоянията са много повече. Ще се ограничим с изучаването само на основното състояние на водородния атом.

За нашите цели не е от значение точното разглеждане на *разположението* на електрона и протона, защото това, което ни трябва, е определено от основното състояние, в което се намира атомът на водорода. Достатъчно е да знаем само, че електронът и протонът се намират недалеч един от друг и могат да имат всевъзможни взаимни ориентации на спиновете си. И ние ще разглеждаме само спиновите ефекти.

Първият въпрос, на който трябва да отговорим, е: какви са *базисните състояния* на тази система? Но така въпросът е поставен неправилно. Такова нещо като единствено базисно състояние

не съществува и никоя базисна система не може да бъде единствена. Винаги могат да се съставят нови базисни системи чрез линейни комбинации на другите. За базисните системи винаги има множество възможности и всички са еднакво законни.

Следователно трябва да попитаме: не „каква е базисната система?“, а „как *можем* да си я изберем?“ И можем да си я изберем както си искаме, стига да ни е удобна и да ни върши работа.

Обикновено най-добре е да започнем със системата, която е *физически* най-очевидна. Не е задължително тя да бъде *непосредствено* свързана с някаква важна величина, а трябва само да помогне за по-лесното разбиране и решаване на задачата.

Нека изберем следните базисни състояния:

Състояние 1. Електронът и протонът имат насочени нагоре спинове.

Състояние 2. Спинът на електрона е насочен нагоре, а на протона — надолу.

Състояние 3. Спинът на електрона е насочен надолу, а на протона — нагоре.

Състояние 4. Електронът и протонът имат насочени надолу спинове.

За по-кратко записване на тези четири състояния ще въведем следните означения:

$$
\begin{aligned}
&\textbf{Състояние 1:}\ |++\rangle;\ \text{електронът има спин } \textit{нагоре}.\\
&\qquad\qquad\ \text{протонът има спин } \textit{нагоре}.\\
&\textbf{Състояние 2:}\ |+-\rangle;\ \text{електронът има спин } \textit{нагоре},\\
&\qquad\qquad\ \text{протонът има спин } \textit{надолу}.\\
&\textbf{Състояние 3:}\ |-+\rangle;\ \text{електронът има спин } \textit{надолу},\\
&\qquad\qquad\ \text{протонът има спин } \textit{нагоре}.\\
&\textbf{Състояние 4:}\ |--\rangle;\ \text{електронът има спин } \textit{надолу},\\
&\qquad\qquad\ \text{протонът има спин } \textit{надолу}.
\end{aligned}
\tag{10.1}
$$

Помнете, че *първият* знак плюс или минус се отнася за електрона, а *вторият* — за протона. За да бъдат винаги пред очите ви тези означения, ние сме ги показали на фиг. 10.1. В случай на нужда ще означаваме тези състояния с $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ и $|4\rangle$.

Вие можете да кажете: „Но частиците взаимодействуват и може би тези състояния съвсем не са правилните базисни състояния. Изглежда, като че ли вие разглеждате двете частици като независими.“ Да, наистина! Наличието на взаимодействие поставя пред вас въпроса за *хамилтониана* на системата, но това, как ще се *опише* системата, не е свързано с взаимодействието. Каквато и базисна система да изберем, това никак не е свързано с нещата, които могат да се случат със системата след това. Даже може да се каже, че атомът не е в състояние да *остава* непрекъснато в избраната базисна система. Това обаче е друг въпрос. Тук вече въпросът е как се менят с времето амплитудите в избраната фиксирана базисна система. Избирайки базисни състояния, ние просто избираме „единични вектори“ за нашето описание.

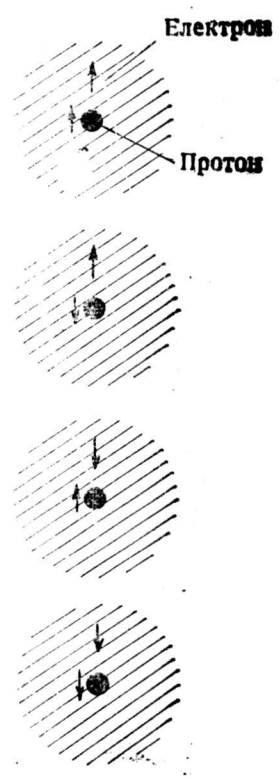
Достигнали веднаж до тези проблеми, нека разгледаме въпроса за намирането на базисни състояния, когато имаме работа с повече от една частица. Вие вече знаете базисните състояния за една частица. Например електронът в реалния живот (а не в нашите опростени случаи) се описва напълно от амплитудата за пребиваване в едно от следните състояния:

$|$Електрон с насочен нагоре спин и импулс $\mathbf{p}\rangle$
или $|$Електрон с насочен надолу спин и импулс $\mathbf{p}\rangle$.

В действителност съществуват две безкрайни съвкупности от състояния, по една за всяко $\mathbf{p}$. Значи може да се каже, че електронното състояние $|\psi\rangle$ се описва напълно само тогава, когато знаете всички амплитуди

$$\langle +,\mathbf{p}|\psi\rangle \quad \text{и} \quad \langle -,\mathbf{p}|\psi\rangle,$$

където $+$ и $-$ представляват компонентите на момента на количество на движение по посока на някаква ос, обикновено оста



Фиг. 10.1. Базисни състояния за основното състояние на водородния атом. Тези състояния означаваме $|++\rangle$, $|+-\rangle$, $|-+\rangle$ и $|--\rangle$.

z, а $\mathbf{p}$ е векторът на импулса. Така че за всеки възможен импулс трябва да съответствуват две амплитуди (двукратно безкрайна съвкупност от базисни състояния). Това е всичко, което е необходимо за описването на отделна частица.

По същия начин могат да бъдат определени и базисните състояния, когато имаме повече от една частица. Например, ако трябва да се разглеждат електрон и протон при по-сложно положение, отколкото в нашия случай, то за базисни състояния могат да бъдат избрани следните:

$|$Електрон с импулс $\mathbf{p}_1$ се движи със спин нагоре,
а протон с импулс $\mathbf{p}_2$ се движи със спин надолу$>$.

И така нататък за всички други възможни спинови комбинации. Ако частиците са повече от две, идеята си остава същата. Така че, както виждате, не е много трудно да се намерят възможните базисни състояния. Въпросът е само в това: какъв е хамилтонианът на системата?

За изучаване на основните състояния на водородния атом не са необходими пълните съвкупности от базисни състояния за различните импулси. Ние приемаме и фиксираме някакви определени импулсни състояния за протона и електрона, когато произнасяме думите „основно състояние". Подробностите на конфигурацията — амплитудите за всички импулсни базисни състояния — могат да се пресметнат, но това вече е друга задача. Сега нас ни интересува само влиянието на спина, така че ще се ограничим само с четирите базисни състояния (10.1). И отново да поставим въпроса: какъв е хамилтонианът за тази съвкупност от състояния?

10-2. Хамилтониан на основното състояние на водородния атом

След минутка ще го научите. Но нека отначало напомним, че *всяко* състояние винаги може да се представи като линейна комбинация на базисните състояния. За всяко състояние $|\psi>$ може да се напише:

$$|\psi> = |++><++|\psi> + |+-><+-|\psi> + |-+><-+|\psi> + |--><--|\psi>. \tag{10.2}$$

Освен това нека си спомним, че целите скобки са просто комплексни числа, така че можем да ги означим с C_i, където $i=1, 2, 3$ или 4, и да запишем (10.2) във вида:

$$|\psi> = |++>C_1 + |+->C_2 + |-+>C_3 + |-->C_4|. \tag{10.3}$$

Задаването на четирите амплитуди C_i напълно описва спиновото състояние $|\psi>$. Ако тази четворка се мени с времето (както е в действителност), скоростта на изменение се дава от оператора $\hat{H}$: Задачата сега е да се определи този оператор $\hat{H}$.

Не съществува общо правило как трябва да се пише хамилтонианът за една атомна система и затова търсенето на правилната формула изисква по-голямо майсторство, отколкото намирането на базисна система. Бихме могли да дадем общо правило за записването на системата базисни състояния за всяка задача, в която участвуват протон и електрон, но да се даде такова правило за написване на общ хамилтониан е много трудно. Вместо това, ние ще достигнем до хамилтониана по пътя на някои евристични разсъждения и вие ще го признаете за верен, защото нашите изводи ще се съгласуват с експерименталните резултати.

Спомнете си, че в предишната глава успяхме да опишем хамилтониана на единична частица със спин 1/2, като приложихме сигма-матриците или еквивалентните им сигма-оператори. Свойствата на операторите са показани в табл. 10.1. Тези оператори просто представляват удобен и кратък начин за запомняне на матричните елементи от типа $<+|\sigma_z|+>$ и са полезни при опис-

ване поведението на *единична* частица със спин 1/2. Възниква въпросът дали могат да се намерят аналогични средства за описване на система с два спина. Да, и то много просто. Сега ще изобретим нещо, което ще наречем „електрон-сигма“ и което ще представяме с векторния оператор $\vec{\sigma}^e$ с три компоненти σ_x^e σ_y^e и σ_z^e. По-нататък нека се *условим*, че когато една от тях действува на някое от четирите базисни състояния на водородния атом, в действителност тя действува само на спина на електрона, и то като на независима частица. Например на колко е равно $\sigma_y^e|--+>$? Понеже в случая σ_y действува на електрон с насочен надолу спин, ще се получи електрон със спин, насочен нагоре, умножен с $-i$:

$$\sigma_y^e|-+>=-i|++>.$$

когато σ_y^e действува на комбинираното състояние, то обръща посоката на спина на електрона, без да засяга състоянието на протона, и умножава резултата с $-i$). Действувайки на други състояния, σ^e дава:

$$\sigma_y^e|++>=i|-+>,$$
$$\sigma_y^e|+->=i|-->,$$
$$\sigma_y^e|-->=-i|+->.$$

Нека още веднаж напомним, че операторът $\vec{\sigma}^e$ действува само на *първия* спинов символ, т. е. на спина на *електрона*.

Сега да определим съответния оператор „протон сигма“, $\vec{\sigma}_p$ Трите му компонента σ_x^p, σ_y^p и σ_z^p действуват подобно на $\vec{\sigma}^e$ само на *протонния спин*. Например, ако σ_x^p действува на четирите базисни състояния, ще се получи (пак с помощта на табл. 10.1)

$$\sigma_x^p|++>=|+->,$$
$$\sigma_x^p|+->=|++>,$$
$$\sigma_x^p|-+>=|-->,$$
$$\sigma_x^p|-->=|-+>.$$

Както виждате, и тук няма нищо трудно.

Разбира се, могат да се срещнат и по-сложни положения. Например някакво смесено произведение между „електрон-сигма“ и „протон-сигма“ оператори. Когато достигнем до такова произведение, отначало действува десният оператор, а след това — левият[1] Например

$$\sigma_x^e\sigma_z^p|+->=\sigma_x^e(\sigma_z^p|+->)=\sigma_x^e(-|+->)$$
$$=-\sigma_x^e|+->=-|-->.$$

Забележете, че тези оператори не действуват върху числа; ние използувахме това, като писахме $\sigma_x^e(-1)=(-1)\sigma_x^e$. Казваме, че операторите „комутират“ с числата или че числата „могат да се прехвърлят“ през операторите. За да се упражните, покажете, че следните примери са верни:

$$\sigma_x^e\sigma_z^p|++>=+|-+>,$$
$$\sigma_x^e\sigma_z^p|+->=-|-->,$$
$$\sigma_x^e\sigma_z^p|-+>=+|++>,$$
$$\sigma_x^e\sigma_z^p|-->=-|+->.$$

Всички подобни възможни оператори са 16. *Шестнадесет*, ако се включи и „единичният оператор“ $\hat{1}$. Първо имаме тройката σ_x^e, σ_y^e и σ_z^e, след това — тройката σ_x^p, σ_y^p и σ_z^p — общо шест. Освен това имаме девет възможни смесени произведения между тях — зна-

Таблица 10.1

Свойства на операторите сигма

$$\sigma_z|+>=+|+>$$
$$\sigma_z|->=-|->$$
$$\sigma_x|+>=+|->$$
$$\sigma_x|->=+|+>$$
$$\sigma_y|+>=+i|->$$
$$\sigma_y|->=-i|+>$$

[1] Конкретно за *тези* оператори се оказва, че действието им не зависи от тяхната последователност.

чи всичко 15. Като добавим и единичния оператор, който не променя нито едно от базисните състояния — стават всичко 16.

Сега обърнете внимание на това, че за система с четири състояния Хамилтоновата матрица трябва да представлява матрица от коефициенти 4×4, значи всичко 16 числа. Лесно е да се покаже, че всяка матрица 4×4 и в частност матрицата на Хамилтон може да бъде записана като линейна комбинация на шестнадесет двойни спинови матрици, съответстващи на системата оператори, които току-що съставихме. Затова за взаимодействието между протон и електрон, което се осъществява само чрез техните спинове, ние можем да очакваме, че операторът на Хамилтон може да бъде записан като линейна комбинация на същите тези 16 оператора. Сега въпросът е как да реализираме тази идея.

Най-напред обаче ние знаем, че взаимодействието не зависи от избора на осите на координатната система. Ако няма външно смущение — като например магнитно поле, отделящо определено направление в пространството — то хамилтонианът не трябва да зависи от избора на посоката на осите x, y и z. Това означава, че в хамилтониана не могат да участвуват сами членове като σ_x^e и подобни. Защото това би довело до други резултати в друга координатна система.

Възможни са единствено членове с единичната матрица $\hat{1}$, например умножена с константа a, и комбинации от сигми, които не зависят от координатите или, както се казва, някаква „инвариантна“ комбинация. Единствената *скаларна* инвариантна комбинация от два вектора е тяхното скаларно произведение, което за нашите сигми има вида:

$$\vec{\sigma^e}\,\vec{\sigma^p} = \sigma_x^e\,\sigma_x^p + \sigma_y^e\,\sigma_y^p + \sigma_z^e\,\sigma_z^p. \tag{10.4}$$

Такъв оператор е инвариантен спрямо всякакви въртения на координатната система. И така, единствената възможност за хамилтониан с подходяща симетрия в пространството остава константа, умножена на единичната матрица плюс константа, умножена на подобно скаларно произведение, т. е.

$$\hat{H} = E_0 + A\,\vec{\sigma^e}\cdot\vec{\sigma^p}. \tag{10.5}$$

Това представлява търсеният от нас хамилтониан. Това е единствената възможност, до която можем да стигнем, като изходим от симетрията в пространството, *докато няма приложено външно поле*. Постоянният член в него не ни говори много; той просто зависи от нивото, което сме избрали за начало при отчитане на енергията. Със същия успех можем да положим $E_0=0$. А във втория член се съдържа всичко, което ни е необходимо, за да изследваме разцепването на нивата на водородния атом.

Ако искате, до този хамилтониан можем да достигнем и по друг път. Ако два магнита се намират близко един до друг и техните магнитни моменти са $\vec{\mu}_e$ и $\vec{\mu}_p$, тяхната енергия зависи освен от всичко друго и от $\vec{\mu}_e\cdot\vec{\mu}_p$. А ние, както помните, обяснихме, че това, което в класическата физика наричахме $\vec{\mu}_e$, в квантовата механика ще се появява като $\mu_e\,\vec{\sigma}_e$. По същия начин това, което в класическата физика е било μ_p, сега в квантовата механика ще се окаже $\mu_p\,\vec{\sigma}_p$ (където μ_p — магнитният момент на протона, е почти 1 000 пъти по-малък от μ_e и има обратен знак). Следователно (10.5) твърди, че енергията на взаимодействие на спиновете е подобна на енергията на взаимодействие на два магнита, но не съвсем, защото взаимодействието между два магнита зависи от разстоянието между тях. Но (10.5) може да се счита (и в действителност *представлява*) един вид средно взаимодействие. Електронът се движи по някакъв начин в атома и нашият хамилтониан дава само средната енергия на взаимодействие. Най-общо казано, всичко това показва, че енергията на взаимодействие между протона и електрона е пропорционална на косинуса на техните магнитни моменти. Подобна качествена класическа картина може да ви помогне да разберете как се получава всичко, а всъщност, единственото важно при това е, че (10.5) е вярната формула в квантовата механика.

Големината на класическото взаимодействие между два магнита трябва да се дава от произведението на техните магнитни моменти, делено на разстоянието между тях на трета степен. Разстоянието между електрона и протона във водородния атом е, грубо казано, равно на половината от атомния радиус, т. е. 0,5 А. Затова може да се предположи, че константата A трябва да бъде равна на произведението на магнитните моменти μ_e и μ_p, делено на третата степен на 0,5 А. Такава оценка води до числа, попадащи точно в търсения район. Константата A обаче може да се пресметне съвсем стриктно, стига да ползуваме пълната квантово-механическа теория на атома, което засега не е по силите ни. В действителност A е била пресметната с точност до 300 милионни. Както виждате, за разлика от константата A, появяваща се при амонячната молекула, която е невъзможно да се пресметне, константата A при водородния атом може да бъде пресметната въз основа на по-точна теория. Така че за сегашните цели ще трябва да считаме A за число, определено от експеримента, и ще анализираме физиката на процеса.

Сега хамилтонианът (10.5) може да се постави в уравнението

$$i\hbar \dot{C}_i = \sum_j H_{ij} C_j \tag{10.6}$$

и да се види какво въздействие оказват спиновите взаимодействия върху енергетичните нива. За тази цел трябва да пресметнем шестнадесетте матрични елемента $H_{ij} = \langle i | H | j \rangle$, отговарящи на всяка двойка от четирите базисни състояния (10.1).

Да започнем с пресмятането на $|\hat{H}|j\rangle$ за всяко от четирите базисни състояния. Например

$$\hat{H}|++\rangle = A\,\sigma^e \cdot \sigma^p |++\rangle = A\{\sigma_x^e \sigma_x^p + \sigma_y^e \sigma_y^p + \sigma_z^e \sigma_z^p\}|++\rangle. \tag{10.7}$$

Като приложим начина, описан малко по-горе (спомнете си табл. 10.1, тя много ще ви помогне), можем да определим действието на всяка двойка σ върху $|++\rangle$. Получаваме

$$\begin{aligned} \sigma_x^e \sigma_x^p |++\rangle &= +|--\rangle, \\ \sigma_y^e \sigma_y^p |++\rangle &= -|--\rangle, \\ \sigma_z^e \sigma_z^p |++\rangle &= +|+-\rangle. \end{aligned} \tag{10.8}$$

Следователно (10.7) се превръща в

$$\hat{H}|++\rangle = A\{|--\rangle - |--\rangle + |+-\rangle + |+-\rangle\} = A|++\rangle. \tag{10.9}$$

А понеже всичките базисни състояния са ортогонални, това веднага води до

$$\begin{aligned} \langle ++|H|++\rangle &= A\langle ++|++\rangle = A, \\ \langle +-|H|++\rangle &= A\langle +-|++\rangle = 0, \\ \langle -+|H|++\rangle &= A\langle -+|++\rangle = 0, \\ \langle --|H|++\rangle &= A\langle --|++\rangle = 0. \end{aligned} \tag{10.10}$$

Като вземем пред вид, че $\langle j|H|i\rangle = \langle i|H|j\rangle^*$, можем веднага да напишем диференциалното уравнение за амплитудата C_1:

$$i\hbar \dot{C}_1 = H_{11}C_1 + H_{12}C_2 + H_{13}C_3 + H_{14}C_4 \tag{10.11}$$

или

$$i\hbar \dot{C}_1 = AC_1.$$

Това е всичко! Само един член.

За да получим останалите хамилтонови уравнения, трябва търпеливо да проведем същите процедури с $\hat{H}$, когато той действува на другите състояния. Отначало се упражнете, като проверите дали са верни всички произведения, показани в табл. 10.2. След това с тяхна помощ можете да получите:

Таблица 10.2

Спинови оператори за водородния атом

$$\begin{aligned} \sigma_x^e \sigma_x^p |++\rangle &= +|--\rangle \\ \sigma_x^e \sigma_x^p |+-\rangle &= +|-+\rangle \\ \sigma_x^e \sigma_x^p |-+\rangle &= +|+-\rangle \\ \sigma_x^e \sigma_x^p |--\rangle &= +|++\rangle \\ \\ \sigma_y^e \sigma_y^p |++\rangle &= -|--\rangle \\ \sigma_y^e \sigma_y^p |+-\rangle &= +|-+\rangle \\ \sigma_y^e \sigma_y^p |-+\rangle &= +|+-\rangle \\ \sigma_y^e \sigma_y^p |--\rangle &= -|++\rangle \\ \\ \sigma_z^e \sigma_z^p |++\rangle &= +|++\rangle \\ \sigma_z^e \sigma_z^p |+-\rangle &= -|+-\rangle \\ \sigma_z^e \sigma_z^p |-+\rangle &= -|-+\rangle \\ \sigma_z^e \sigma_z^p |--\rangle &= +|--\rangle \end{aligned}$$

$$\hat{H}\,|+-\rangle = A\{2\,|-+\rangle - |+-\rangle\},$$
$$\hat{H}\,|-+\rangle = A\{2\,|+-\rangle - |-+\rangle\}, \qquad (10.12)$$
$$\hat{H}\,|--\rangle = A\,|--\rangle.$$

И тогава, като ги умножим подред с всички други вектори на състоянията, получаваме следната хамилтонова матрица

$$H_{ij} = \begin{matrix} \\ i\downarrow \end{matrix} \overset{\overset{j}{\downarrow}}{\begin{pmatrix} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A & 2A & 0 \\ 0 & 2A & -A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A \end{pmatrix}}. \qquad (10.13)$$

Това означава, че диференциалните уравнения за четирите амплитуди C_i имат вида

$$i\hbar\dot{C}_1 = AC_1,$$
$$i\hbar\dot{C}_2 = -AC_2 + 2AC_3, \qquad (10.14)$$
$$i\hbar\dot{C}_3 = 2AC_2 - AC_3,$$
$$i\hbar\dot{C}_4 = AC_4.$$

Но преди да преминем към тяхното решение, не мога да се сдържа и ще ви разкажа за едно умно правило, въведено от Дирак. То ще ви помогне да почувствувате колко много вече знаете, макар че непосредствено не ще ни потрябва. От уравненията (10.9) и (10.12) имаме

$$\vec{\sigma}^e.\vec{\sigma}^p\,|++\rangle = |++\rangle,$$
$$\vec{\sigma}^e.\vec{\sigma}^p\,|+-\rangle = 2\,|-+\rangle - |+-\rangle, \qquad (10.15)$$
$$\vec{\sigma}^e.\vec{\sigma}^p\,|-+\rangle = 2\,|+-\rangle - |-+\rangle,$$
$$\vec{\sigma}^e.\vec{\sigma}^p\,|--\rangle = |--\rangle.$$

„Вижте — казал Дирак, — първото и последното уравнение аз мога да запиша също и във вида

$$\vec{\sigma}^e.\vec{\sigma}^p\,|++\rangle = 2\,|++\rangle - |++\rangle,$$
$$\vec{\sigma}^e.\vec{\sigma}^p\,|--\rangle = 2\,|--\rangle - |--\rangle$$

и тогава и четирите уравнения ще си приличат. Сега аз ще приложа нов оператор, който ще означа $P_{\text{спин обмен}}$ и който по *определение* ще притежава следните свойства[1]:

$$P_{\text{спин. обмен}}\,|++\rangle = |++\rangle,$$
$$P_{\text{спин. обмен}}\,|+-\rangle = |-+\rangle,$$
$$P_{\text{спин. обмен}}\,|-+\rangle = |+-\rangle,$$
$$P_{\text{спин. обмен}}\,|--\rangle = |--\rangle.$$

Както виждате, този оператор само заменя посоките на спиновете на двете частици. Тогава цялата система уравнения (10.15) може да бъде записана като едно просто операторно уравнение

$$\vec{\sigma}^e.\vec{\sigma}^p = 2P_{\text{спин. обмен}} - 1\text{“}. \qquad (10.16)$$

Това представлява и известната формула на Дирак. Операторът на обмен на спиновете дава удобен начин за запомняне на $\vec{\sigma}^e.\vec{\sigma}^p$. (Както виждате, вие вече можете да правите всичко. Пред вас са отворени всички врати.)

[1] Сега този оператор се нарича *оператор на спиновия обмен.*

10-3. Енергетични нива

Сега, като решим уравненията (10.14), ние можем да изчислим енергетичните нива на основното състояние на водородния атом. Ние си поставяме задача да намерим енергиите на стационарните състояния. Това означава, че трябва да намерим онези състояния $|\psi>$, за които всяка една от принадлежащите им амплитуди $C_i = <i \mid \psi>$ притежава една и съща зависимост от времето, а именно $e^{-i\omega t}$. Тогава състоянията ще притежават енергии $E=\hbar\omega$. Следователно търсим съвкупностите от амплитуди, за които

$$C_i = a_i\, e^{-(i/\hbar)Et}. \tag{10.17}$$

Тук четирите коефициента a_i не зависят от времето. Да опитаме да получим тези амплитуди, като заместим (10.17) в (10.14) и да видим какво ще излезе. Всяко $i\hbar\, dC_i/dt$ в (10.14) ще премине в EC_i, а след съкращаване на общия експоненциален множител всяко C_i ще се превърне в a_i; така получаваме

$$\begin{aligned} Ea_1 &= Aa_1,\\ Ea_2 &= -Aa_2 + 2Aa_3,\\ Ea_3 &= 2Aa_2 - Aa_3,\\ Ea_4 &= Aa_4. \end{aligned} \tag{10.18}$$

За да определим a_1, a_2, a_3 и a_4, необходимо е да решим тази система. Наистина много добре е от страна на първото уравнение в тази система, че не зависи от останалите — а това означава, че едно решение вече се вижда. Ако изберем $E=A$, то

$$a=1, \quad a_2=a_3=a_4=0$$

дава едно възможно решение. (Разбира се, ако положим всички a равни на нула, това също е решение, но от тях не можем да образуваме състояние.) Ще считаме, че нашето първо решение за състоянието $|I>$[1] е:

$$|I> = |1> = |++>. \tag{10.19}$$

Неговата енергия е

$$E_I = A.$$

Всичко това веднага дава ключ за намиране на второ решение, което можем да получим от последното уравнение в (10.18):

$$\begin{gathered} a_1=a_2=a_3=0, \qquad a_4=1,\\ E=A. \end{gathered}$$

Това решение ние ще наречем състояние $|II>$:

$$\begin{gathered} |II> = |4> = |--> \\ E_{II} = A. \end{gathered} \tag{10.20}$$

По-нататък нещата са малко по-трудни; останалите две уравнения в (10.18) са свързани помежду си. Ние вече се справяхме с подобни положения. Сумирайки тези уравнения, ще получим

$$E\,(a_2+a_3) = A\,(a_2+a_3). \tag{10.21}$$

А разликата между тях ще даде

$$E\,(a_2-a_3) = -3A\,(a_2-a_3). \tag{10.22}$$

Ако си спомним случая с амоняка, ще видим, че тук имаме две решения

[1] В действителност състоянието представлява $|I> e^{-(i/\hbar)E_I t}$, но както обикновено, ще отъждествяваме състоянията с постоянни вектори, които при $t=0$ съвпадат с истинските вектори.

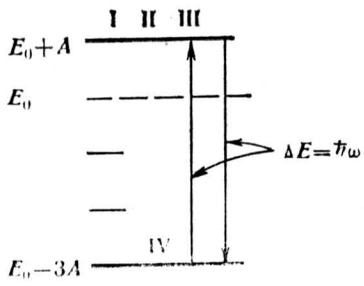
$$a_2 = a_3, \qquad E = A,$$
$$a_2 = -a_3, \qquad E = -3A. \tag{10.23}$$

Тези решения са смес на състоянията $|2>$ и $|3>$. Като ги означим с $|III>$ и $|IV>$ и поставим нормировъчния множител $1/\sqrt{2}$, ще имаме

$$|III> = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2> + |3>)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-> + |-+>), \tag{10.24}$$

и

$$E_{III} = A$$
$$|IV> = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2> - |3>)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-> - |-+>), \tag{10.25}$$
$$E_{IV} = -3A.$$



Фиг. 10.2. Диаграма на енергетичните нива на основното състояние на водородния атом

По такъв начин определихме четирите стационарни състояния и техните енергии. Забележете, че тези четири състояния са ортогонални едно на друго, така че ако искаме, можем да ги вземем и за базисни. И така, нашата задача е напълно решена.

За трите състояния енергията е равна на A, а за четвъртото $-3A$. Средно енергията е равна на нула, което означава, че полагайки в (10.5) $E_0 = 0$, ние отчитаме всички енергии от тяхната средна стойност. Диаграмата на енергетичните нива на водородния атом ще изглежда така, както е показано на фиг. 10.2.

Разликата в енергиите между състоянието $|IV>$ и кое да е от останалите състояния е $4A$. В такъв случай водороден атом, намиращ се по някакви причини в състояние $|I>$, може да премине в състояние $|IV>$, като изпусне светлина: но не във видимата част на спектъра, защото енергията е малка, а микровълнов квант. Или обратното: ако осветим водороден газ с микровълни, ще забележим поглъщане на енергията, защото атомите от състояние $|IV>$ ще преминат в едно от другите три състояния; но всичко това само при честота на микровълните $\omega = \frac{4A}{\hbar}$. Тази честота е била измерена експериментално, като най-точният резултат, получен сравнително неотдавна[1] (1963 г.), е:

$$f = \frac{\omega}{2\pi} = (1\,420\,405\,751{,}800 \pm 0{,}028)\ \text{Hz} \tag{10.26}$$

Грешката при това измерване представлява само три стомилиардни! Изглежда, нито една друга фундаментална физическа величина не е измерена по-точно от тази; това измерване е едно от най-точните във физиката въобще[2]. Теоретиците бяха много щастливи, когато успяха да изчислят енергията с точност до 3.10^{-5}, но същевременно експерименталното измерване беше извършено с точност 2.10^{-11}, т. е. милион пъти по-точно. Така че експериментаторите вървят далеч по-напред от теоретиците.

Вие сигурно вече сте слушали за „21-сантиметровата линия“ на водорода. Това е точно дължината на вълната на спектралната линия при 1420 MHz, дължаща се на преходите между състоянията на свръхфиното разцепване. Лъчение с такава честота се излъчва или поглъща от атомарния водороден газ в галактиките. Така че с радиотелескоп, настроен на вълна 21 cm, могат да се наблюдават скоростите и разположението на водородни облаци в Галактиката. Измервайки интензитета на лъчението, може да се оцени количеството водород, а чрез измерване на Доплеровото изменение на честотата може да се изучи движе-

[1] Crampton. Kleppner, Ramsey, „Physical Review letters, **11**, (1963), 338.
[2] Съществува още по-точно измерване на тази величина (L. Essen etal., „Nature“, 229 (1970), 110: $f = (1\,420\,405\,751{,}7667 \pm 0{,}0010)$ Hz (бел. на бълг. ред.)

нието на газа в Галактиката. Това е един от основните проблеми на радиоастрономията. Така че сега ние с вас разглеждаме нещо съвсем реално и важно, а не някаква изкуствена задача.

10-4. Зееманово разцепване

Макар че вече се справихме със задачата за определяне на енергетичните нива на основните състояния на водородния атом, ние ще продължим изучаването на тази интересна система. За да се каже още нещо за нея, например да се пресметне скоростта, с която водородният атом поглъща или изпуска радиовълни с дължина 21 см, трябва да се знае какво става със системата, когато тя е смутена. Трябва да се направи същото, което направихме и с молекулата на амоняка, след като бяхме определили енергетичните нива, ние продължихме по-нататък и изяснихме какво става, когато молекулата се намира в електрично поле. В случая на водороден атом електричното поле не оказва никакво съществено влияние върху енергетичните нива, само ги измества с постоянна величина, пропорционална на квадрата на полето, а това не е интересно за нас, защото не изменя *разликата* в енергиите на нивата. Сега вече е необходимо *магнитно* поле. Следователно нашата следваща крачка ще бъде да напишем хамилтониана за по-сложния случай, когато водородният атом се намира във външно магнитно поле.

Какъв е този хамилтониан? Ние направо ще ви го напишем, защото не можем да дадем никакво „доказателство“ или „извод“ освен да кажем, че атомът е устроен именно така. Този хамилтониан има вида

$$\hat{H} = A\,(\vec{\sigma}^{e}\cdot\vec{\sigma}^{p}) - \mu_e\vec{\sigma}^{e}\cdot\mathbf{B} - \mu_p\,\vec{\sigma}^{p}\cdot\mathbf{B}. \qquad (10.27)$$

Той се състои от три части. Първият член $A\,(\vec{\sigma}^{e}\cdot\vec{\sigma}^{p})$ представлява магнитното взаимодействие между електрона и протона; той е същият, какъвто би бил и ако не съществуваше магнитно поле. Влиянието на магнитното поле се дава от останалите два члена. Вторият член $(-\mu_e\,\vec{\sigma}^{e}\cdot\mathbf{B})$ дава енергията, която би притежавал единичен електрон в магнитно поле[1]. По същия начин последният член $(-\mu_p\,\vec{\sigma}^{p}\cdot\mathbf{B})$ представлява енергията на единичен протон. По правилата на класическата физика тяхната обща енергия трябва да бъде сумата от енергиите на двете частици; това е вярно и в квантовата механика. Енергията на взаимодействие, която възниква поради наличието на магнитно поле, е сума от енергията на взаимодействие на електрона с магнитното поле, и тази на протона със същото магнитно поле, всичко това изразено чрез операторите сигма. В квантовата механика всъщност тези членове не са енергии, но ние се обръщаме към класическите формули само за да си помогнем и да запомним начина на записване на хамилтониана. Така или иначе (10.27) представлява верният хамилтониан.

Сега трябва да се върнем и да започнем решаването на задачата отначало. Но по-голямата част от работата е вече извършена, трябва само да се добавят ефектите, дължащи се на новите членове. Нека приемем, че магнитното поле $\mathbf{B}$ е постоянно и насочено по посока на z. Тогава към нашия стар хамилтонов оператор $|\hat{H}|$ трябва да се добавят два нови члена; нека ги означим с

$$\hat{H}' = -(\mu_e\,\sigma_z^{e} + \mu_p\,\sigma_z^{p})\,B.$$

---

[1] Спомнете си, че в класическата теория $U = -\vec{\mu}\cdot\mathbf{B}$, така че енергията е минимална, когато моментът е насочен по посока на полето. За положително заредени частици магнитният момент е насочен по посока на спина, а за отрицателни частици — в обратна посока. Следователно в (10.27) μ_p е *положително* число, а μ_e — *отрицателно*.

Като използуваме таблицата (10.1), веднага можем да получим

$$\begin{aligned}
\hat{H}' \mid ++> &= -(\mu_e+\mu_p)\, B \mid ++>,\\
\hat{H}' \mid +-> &= -(\mu_e-\mu_p)\, B \mid +->,\\
\hat{H}' \mid -+> &= -(-\mu_e+\mu_p)\, B) \mid -+>,\\
\hat{H}' \mid --> &= +(\mu_e+\mu_p)\, B \mid -->.
\end{aligned} \tag{10.28}$$

Виждате колко е удобно. Операторът $\hat{H}'$, действувайки на всяко състояние, дава число, умножено на първоначалното състояние. Така че в матрицата $<i \mid H' \mid j>$ участвуват само *диагоналните* елементи и може просто да се добавят коефициентите от (10.28) към съответните диагонални членове в (10.13); по такъв начин хамилтоновите уравнения (10.14) добиват вида:

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{dC_1}{dt} &= \{A-(\mu_e+\mu_p)\, B\}\, C_1,\\
i\hbar \frac{dC_2}{dt} &= -\{A+(\mu_e-\mu_p)\, B\}\, C_2+2AC_2,\\
i\hbar \frac{dC_3}{dt} &= 2AC_2-\{A-(\mu_e-\mu_p)\, B\}\, C_3,\\
i\hbar \frac{dC_4}{dt} &= \{A+(\mu_e+\mu_p)\, B\}\, C_1.
\end{aligned} \tag{10.29}$$

Както виждате, формата на уравненията не се изменя, изменят се само коефициентите. И сега, щом като B не се мени с времето, всички пресмятания се извършват, както и по-рано.

Като заместим $C_i = a_i\, e^{-(i/\hbar)Et}$, получаваме

$$\begin{aligned}
Ea_1 &= \{A-(\mu_e+\mu_p)\, B\}\, a_1,\\
Ea_2 &= -(A+(\mu_e-\mu_p)\, B\}\, a_2+2Aa_3,\\
Ea_3 &= 2Aa_2-\{A-(\mu_e-\mu_p)\, B\}\, a_3,\\
Ea_4 &= \{A+(\mu_e+\mu_p)\, B\}\, a_4.
\end{aligned} \tag{10.30}$$

За наша радост, както и по-рано, първото и последно уравнение не зависят от останалите, така че можем да приложим старата техника.

Едното решение е състоянието $\mid I>$, за което

$$a_1=1, \quad a_2=a_3=a_4=0,$$

или

$$\begin{aligned}
\mid I> &= \mid 1> = \mid ++>,\\
E_I &= A-(\mu_e+\mu_p)\, B.
\end{aligned} \tag{10.31}$$

с

Другото решение е

$$\begin{aligned}
\mid II> &= \mid 4> = \mid -->,\\
E_{II} &= A+(\mu_e+\mu_p)\, B.
\end{aligned} \tag{10.32}$$

и

За да се справим с другите две уравнения, ще е необходимо повече работа, защото коефициентите пред a_2 и a_3 не са равни помежду си. Но за сметка на това те много приличат на онези две уравнения, които писахме за молекулата на амоняка. Разглеждайки уравненията (7.20) и (7.21), можем да направим следната аналогия (помнете, че индексите 1 и 2 в тези уравнения съответствуват на индексите 2 и 3 в новите)

$$\begin{aligned}
H_{11} &\to -A-(\mu_e-\mu_p)\, B,\\
H_{12} &\to 2A,\\
H_{21} &\to 2A,\\
H_{22} &\to -A+(\mu_e-\mu_p)\, B.
\end{aligned} \tag{10.33}$$

По-рано енергията се определяше от формула (7.25), която имаше вида

$$E=\frac{H_{11}+H_{22}}{2}\pm\sqrt{\frac{(H_{11}-H_{22})^2}{4}+H_{12}H_{21}}\,. \qquad (10.34)$$

Замествайки тук (10.33), получаваме за енергията

$$E=-A\pm\sqrt{(\mu_e-\mu_p)^2B^2+4A^2}.$$

В гл. 7 тези енергии означавахме с E_I и E_{II}, а сега ще ги означим с E_{III} и E_{IV}:

$$\begin{aligned}E_{III}&=A\{-1+2\sqrt{1+(\mu_e-\mu_p)^2B^2/4A^2}\};\\ E_{IV}&=-A\{1+2\sqrt{1+(\mu_e-\mu_p)^2B^2/4A^2}\}.\end{aligned} \qquad (10.35)$$

И така определихме енергията на четирите стационарни състояния на водородния атом в постоянно магнитно поле. Да проверим нашите пресмятания, като оставим B да клони към нула и да видим ще се получат ли резултатите от предишното разглеждане. Виждате, че всичко е наред: при $B=0$ енергиите E_I, E_{II} и E_{III} стават $+A$, а $E_{IV}=-3A$. Но когато включим магнитното поле, всяка от тези четири енергии се мени по своему. Да видим как става това.

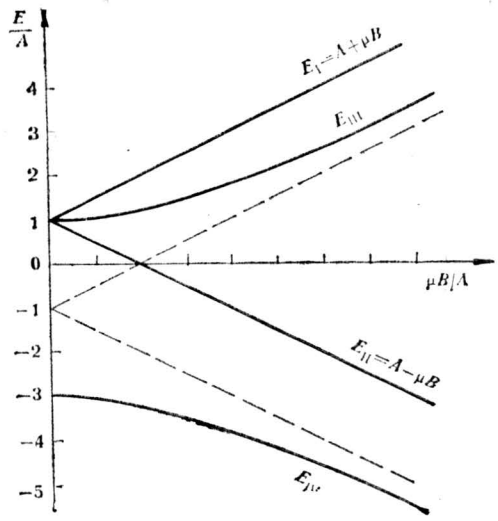
Нека отначало напомним, че μ_e на електрона е отрицателно и почти 1000 пъти по-голямо от μ_p, което е положително. Поради това $\mu_e+\mu_p$ и $\mu_e-\mu_p$ са отрицателни и почти равни едно на друго. Да ги означим с $-\mu$ и $-\mu'$:

$$\mu=-(\mu_e+\mu_p),\qquad \mu'=-(\mu_e-\mu_p) \qquad (10.36)$$

(μ и μ' са положителни и почти съвпадат по големина с μ_e, което е приблизително равно на един магнетон на Бор). Тогава четирите енергии ще се превърнат в

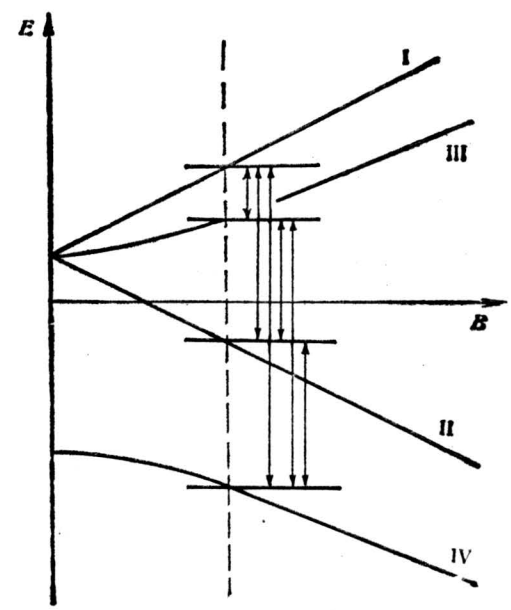
$$\begin{aligned}E_I&=A+\mu B,\\ E_{II}&=A-\mu B,\\ E_{III}&=A\{-1+2\sqrt{1+\mu'^2B^2/4A^2}\},\\ E_{IV}&=-A\{1+2\sqrt{1+\mu'^2B^2/4A^2}\}.\end{aligned} \qquad (10.37)$$

Първоначално енергията E_I е равна на A, а след това расте линейно с B със скорост μ. Енергията E_{II} също отначало е равна на A, но с нарастване на B *намалява* линейно пак със скорост μ. Изменението на тези нива е показано на фиг. 10.3. На тази фигура са показани измененията на E_{III} и E_{IV}. Тяхната зависимост от B е друга: при малки B те зависят от B квадратично, отначало наклонът на кривата е равен на нула, след това тя започва да се изкривява и при *големи* B се приближава към правите с наклон $\pm\mu'$, близък до наклона на E_I и E_{II}.



Фиг. 10.3. Енергетичните нива на основното състояние на водорода в магнитно поле **B**. Кривите E_{III} и E_{IV} се приближават към правите $A\pm\mu'B$

Отместването на енергетичните нива, предизвикано от действието на магнитното поле се нарича *ефект на Зееман*. Прието е да се казва, че кривите на фиг. 10.3 показват *зеемановото разцепване* на основното енергетично състояние на водородния атом. Когато не е приложено магнитно поле, се наблюдава само една спектрална линия. Преходите между състоянието $|\,IV\rangle$ и кое да е от останалите три протичат с поглъщане или изпускане на фотони с честота 1420 MHz: $\frac{1}{h}$, умножено на разликата в енергиите $4A$. Но когато атомът се намира в магнитно поле B, се наблюдават много повече спектрални линии: могат да се извършват преходи между които и да е две от всички четири състояния. Значи енергията може да се поглъща или изпуска в който и да е от шестте възможни прехода, показани на фиг. 10.4 с вертикални стрелки. Много от тези преходи могат да бъдат наблюдавани с помощта на метода на молекулните снопове на Раби, описани от нас в гл. 35, § 3.



Фиг. 10.4. Преходи между енергетичните нива на основното състояние на водородния атом в магнитно поле **B**

Коя е причината за преходите? Те се появяват, ако наред със силното постоянно магнитно поле **B** се приложи и слабо смущаващо поле, което се мени с времето. Същото наблюдавахме и при действието на променливото електрично поле върху молекулата на амоняка. Само че сега причина за преходите се явява магнитното поле, действуващо върху магнитните моменти на електрона и протона. Но теоретичните пресмятания остават същите, каквито и при амоняка. Те се получават най-лесно, когато се вземе смущаващото магнитно поле, въртящо се в равнината *xy*, макар че резултатът ще бъде същият и при действието на каквото и да е осцилиращо хоризонтално поле. Ако вие поставите това смущаващо поле като добавъчен член в хамилтониана, ще получите решения, в които амплитудите ще се менят с времето, както това беше при амоняка. Следователно вие лесно и точно ще можете да пресметнете вероятностите за преходи от едно състояние в друго. И ще установите, че всичко съвпада много добре с експеримента.

10-5. Състояния в магнитно поле

Сега да се занимаем с формата на кривите на фиг. 10.3. Първо, ако говорим за силни полета, зависимостта на енергията от полето е много интересна и лесно обяснима. При достатъчно големи B (а именно при $\mu B/A \gg 1$) във формула (10.37) може да се пренебрегне единицата и четирите енергии се изразяват като

$$E_I = A+\mu B, \qquad E_{II}=A-\mu B,$$
$$E_{III}=-A+\mu' B, \qquad E_{IV}=-A-\mu' B. \tag{10.38}$$

Това са уравненията на четирите прави от фиг. 10.3. Техният физически смисъл е следният. Природата на стационарните състояния в *нулево* поле напълно се определя от взаимодействието на двата магнитни момента. Смесването на базисните състояния $|+-\rangle$ и $|-+\rangle$ в стационарните състояния $|III\rangle$ и $|IV\rangle$ е предизвикано от това взаимодействие. Едва ли може да се очаква обаче, че в *силни външни* полета всяка от тези частици (и протона, и електрона) ще изпитва влиянието на полето на другата частица; всяка от тях ще действува като че ли е сама във външното поле. Тогава (както вече многократно видяхме) спинът на електрона ще се окаже насочен по силовите линии на външното магнитно поле (в същата или в противна посока).

Нека спинът на електрона да е насочен нагоре, т. е. по посока на полето; енергията му ще бъде $-\mu_e B$. При това положение поведението на протона може да бъде различно. Ако неговият спин е насочен също нагоре, енергията му ще бъде $-\mu_p B$. Общата енергия ще стане $-(\mu_e+\mu_p)B=\mu B$. А това всъщност е енергията E_I и значи всичко е наред, защото сега описваме състоянието $|++\rangle=|I\rangle$. Съществува и допълнителният член A (малък, понеже сега $\mu B \gg A$), представляващ енергията на взаимодействие на протона и електрона, когато спиновете им са успоредни. (От самото начало считаме A за положително, защото това се изисква от теорията; това се потвърждава и от опита.) Но спинът на протона може да бъде насочен и надолу. Тогава енергията му във външно магнитно поле ще бъде $+\mu_p B$, а заедно с електрона ще имат обща енергия $-(\mu_e-\mu_p)B=\mu B$. А енергията на взаимодействието става $-A$ и тяхната сума дава енергията E_{III} от формула (10.38). Така че състоянието $|III\rangle$ в силни магнитни полета е идентично със състоянието $|+-\rangle$.

Нека сега спинът на електрона да е насочен надолу. Във външно поле неговата енергия ще бъде равна на $\mu_e B$. Ако и протонът „гледа" надолу, общата енергия ще бъде $(\mu_e+\mu_p)B=-\mu B$ *плюс* енергията на взаимодействие A (понеже спиновете сега са успоредни). Това дава енергията E_{II} от израза (10.38) и съответствува на състоянието $|--\rangle=|II\rangle$, което е много мило от негова страна! И на края, ако спинът на електрона е насочен

надолу, а на протона — нагоре, общата енергия ще стане $(\mu_e - \mu_p)B - A$ (*минус* A, защото спиновете са с противоположни посоки), т. е. енергията E_{IV}, която съответствува на състоянието $|-+>$.

„Но почакайте за минутка — ще кажете вие, — състоянията $|III>$ и $|IV>$ *не съответствуват* на състоянията $|+->$ и $|-+>$; те представляват тяхна „*смес*“. Наистина това е вярно, но е едва забележимо. Действително при $B=0$ те представляват смес, но все още ние не сме изяснили какво става при големи B. Когато за получаване на енергията на стационарните състояния използувахме аналогията между (10.33) и формулите от гл. 7, бихме могли да вземем и необходимите амплитуди. Те се получават от (7.23):

$$\frac{a_2}{a_3} = \frac{E - H_{22}}{H_{11}} .$$

Разбира се, отношението a_2/a_3 съответствува на C_2/C_3. Като заместим с аналогичните величини от (10.33), получаваме

$$\frac{C_2}{C_3} = \frac{E + A - (\mu_e - \mu_p)B}{2A} ,$$

или

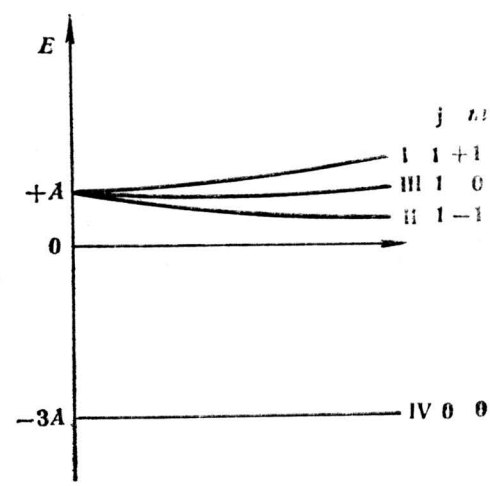
$$\frac{C_2}{C_3} = \frac{E + A + \mu' B}{2A} , \tag{10.39}$$

където вместо E трябва да се поставя подходящата енергия (или E_{III}, или E_{IV}). Например за състоянието $|III>$ ще имаме

$$\left(\frac{C_2}{C_3}\right)_{III} \approx \frac{\mu' B}{A} . \tag{10.40}$$

Следователно при големи B за състоянието $|III>$ $C_2 \gg C_3$; тогава то почти напълно съвпада с $|2> = |+->$. По същия начин, ако в (10.39) се постави E_{IV}, ще се получи $(C_2/C_3)_{IV} \ll 1$, т. е. в силни магнитни полета състоянието $|IV>$ преминава в състоянието $|3> = |-+>$. Вие виждате, че коефициентите в линейните комбинации от базисни състояния, които образуват стационарните състояния, сами зависят от B. Състоянието, което наричаме $|III>$, в слаби полета представлява смес от $|+->$ и $|-+>$ в отношение 1 : 1, но в силни полета то изцяло се измества към $|+->$. По същия начин състоянието $|IV>$, което в слаби полета също представлява смес от $|+->$ и $|-+>$ в отношение 1 : 1 (с обратен знак), преминава в състоянието $|-+>$, когато поради силното външно поле спиновете на частиците вече не са свързани помежду си.

Иска ни се да обърнем вашето внимание на случая, когато имаме *много слаби* магнитни полета. Съществува една енергия $(-3A)$, която *не се изменя* при включване на слабо магнитно поле. Съществува и друга енергия $(+A)$, която при включване на слабо магнитно поле се разцепва на три различни енергетични нива. В слаби полета енергията се изменя с нарастването на B, както това е показано на фиг. 10.5. Да допуснем, че по някакъв начин имаме избрано множество от водородни атоми, всички с енергия $-3A$. Ако ги пропуснем през прибора на Щерн—Герлах (със слабо магнитно поле), ще установим, че всички атоми преминават свободно през него. (Понеже енергията им не зависи от B, според принципа на виртуалната работа градиентът на магнитното поле не създава никаква сила, която да им действува.) Нека, от друга страна, сме избрали друга групичка атоми с енергии $+A$ и да пропуснем и тях през подобен прибор на Щерн—Герлах, да кажем през прибора S. (Полетата пак не трябва да са силни, за да не се разруши атомът; подразбира се, че полетата са толкова слаби, че енергиите зависят от B линейно). В този случай бихме получили *три снопа*. На състоянията $|I>$ и $|II>$ ще действуват противоположни сили, тяхната енергия ще се мени линейно с B (с наклон $\pm\mu$); така че силите са аналогични на силите, дей-



Фиг. 10.5. Състоянията на водородния атом в слаби магнитни полета

ствуващи на дипол, за който $\mu_z = \mp\mu$, а състоянието $|III>$ ще премине, без да претърпи изменение. Така пак се връщаме към описания в гл. 3 случай. *Водороден атом с енергия* $+A$ *има поведение на частица със спин 1.* Това енергетично състояние се явява „частица" с $j=1$ и може да се опише в термините на базисните състояния $|+S>$, $|0S>$ и $|-S>$ (спрямо някоя координатна система в пространството) (вж. гл. 3). От друга страна, когато водороден атом има енергия $-3A$, той има поведение на частица със спин нула. (Пак да подчертаем: в безкрайно слаби магнитни полета.) И така можем да опишем енергетичните състояния на водороден атом в отсъствие на магнитно поле по следния начин:

$$\left.\begin{aligned} |I> &= |++>, \\ |III> &= \frac{|+->+|-+>}{\sqrt{2}} \\ |II> &= |--> \end{aligned}\right\} \text{ спин } 1 \left\{\begin{aligned} &|+S> \\ &|0S>, \\ &|-S> \end{aligned}\right. \qquad (10.41)$$

$$|IV> = \frac{|+->-|-+>}{\sqrt{2}} \quad \text{спин } 0. \qquad (10.42)$$

В гл. 35 (т. 2) ние показахме, че за всяка частица компонентите на момента на количество на движение по посока на която и да е от осите може да взема само определени стойности, винаги кратни на $\hbar$. Така, z-компонентата на момента на количество на движение J_z може да бъде равна на $j\hbar$, $(j-1)\hbar$, . . ., $(-j)\hbar$, където j е спинът на частицата (който може да бъде цял или полуцял). Обикновено се пише:

$$J_z = m\hbar, \qquad (10.43)$$

където m означава кое да е от числата j, $j-1$, $j-2$, . . ., $-j$. Затова вие често ще срещате в различни книги по квантова механика номерация на четирите основни състояния с помощта на т. нар. *квантови числа* j и m (често наричани „квантови числа на пълния момент на количество на движение" j и „магнитно квантово число" m). Вместо нашите символи $|I>$, $|II>$ и т. н. често се практикува означаване на състоянията във вида $|j, m>$. Състоянията при нулево магнитно поле [формулите (10.41) и (10.42)] в новите означения биха изглеждали, както е показано на табл. 10.3. В това няма нова физика, а е само въпрос на означение.

Таблица 10.3

Състояния на водородния атом в нулево поле

състояния $\|j, m>$	j	m	наши означения
$\|1, +1>$	1	+1	$\|I> = \|+S>$
$\|1, 0>$	1	0	$\|III> = \|0S>$
$\|1, -1>$	1	−1	$\|II> = \|-S>$
$\|0, 0>$	0	0	$\|IV>$

10-6. Проекционна матрица за спин 1[1]

Сега искаме да приложим нашите знания за водородния атом към една специална задача. В гл. 3 споменахме, че частица със *спин 1*, която се намира в едно от базисните състояния (+, 0, −) спрямо прибора на Щерн-Герлах с някаква произволна ориентация (да кажем спрямо прибора S) притежава определена амплитуда за пребиваване в едно от трите състояния спрямо прибора T, ориентиран по друг начин в пространството. Съществуват девет такива амплитуди $<jT/iS>$, които заедно образуват проекционната матрица. В гл. 3, § 7 ние написахме без доказателство елементите на тази матрица за различни ориентации на T спрямо S. Сега искаме да ви покажем един начин за тяхното извеждане.

Водородният атом представлява система със спин 1 и е съставен от две частици със спин 1/2. В гл. 4 вече разгледахме преобразованията на амплитудите за частици със спин 1/2. Те могат да се приложат, за да се получат преобразованията за частици със спин 1. Ето как се прави това: имаме система (водороден атом с енергия $+A$) със спин 1; нека я прекараме през филтъра S на Щерн—Герлах, така че да знаем в какво базисно

[1] Тези, които са прескочили гл. 4, могат да пропуснат и този параграф.

състояние спрямо S се намира да кажем в $|+S\rangle$. Каква е амплитудата тя да се окаже в едно от базисните състояния, например $|+T\rangle$ на прибора T? Ако вие означите с x, y, z координатната система на прибора S, състоянието $|+S\rangle$ е еквивалентно на $|++\rangle$. Но представете си, че някакъв ваш приятел, който се занимава със същия проблем, е прекарал своята ос z по оста на T. Неговите състояния ще се описват в координатната система x', y', z' и неговите състояния „нагоре“ и „надолу“ за електрона и протона ще се различават от вашите. *Неговото* състояние „плюс-плюс“, което можем да запишем като $|+'+'\rangle$, отбелязвайки с това неговата „примована“ система, ще бъде $|+T\rangle$. А вас ви интересува амплитудата $\langle+T\,|+S\rangle$, което е само един друг начин за записване на амплитудата $\langle+'+'\,|++\rangle$.

Амплитудата $\langle+'+'\,|++\rangle$ може да се определи по следния начин. Във *вашата* система спинът на *електрона* в състояние $|++\rangle$ е насочен *нагоре*. Това означава, че за него съществува някаква амплитуда $\langle+'\,|+\rangle_e$ той да се окаже в координатната система на вашия приятел със спин, насочен нагоре, и някаква друга амплитуда $\langle-'\,|+\rangle_e$ той да се окаже в тази система със спин насочен надолу. По същия начин, *протон* в състояние $|++\rangle$ със спин *нагоре* във *вашата* система има амплитуди $\langle+'\,|+\rangle_p$ и $\langle-'\,|+\rangle_p$ да се окаже със спин нагоре или надолу в „примованата координатна система. Понеже има две различни частици, амплитудата за това и *двете* частици *едновременно* да се окажат в *неговата* координатна система със спин нагоре, ще бъде равна на произведението на отделните амплитуди:

$$\langle+'+'\,|++\rangle=\langle+'\,|+\rangle_e\,\langle+'\,|+\rangle_p. \qquad (10.44)$$

Ние поставихме индексите e и p под амплитудите, за да бъде ясно какво правим. Всъщност това са просто амплитуди за преобразуване на частици със спин 1/2, така че в действителност това са едни и същи числа. Фактически това са амплитудите, които в гл. 4 нарекохме $\langle+T+S\rangle$ и които бяха показани в табл. 4.1 и 4.2.

Но сега пък сме заплашени от объркване в означенията. Трябва да можем да различаваме амплитудата $\langle+T\,|+S\rangle$ за частици със *спин 1/2* от това, което ние също нарекохме $\langle+T\,|+S\rangle$, но за *спин 1* — между тях няма нищо общо! Надявам се, че вече няма много да се объркате, ако *временно* въведем други означения на амплитудите за спин 1/2. Те са показани в табл. 10.4. А за частици със спин 1, както и по-рано, ще употребяваме означенията $|+S\rangle$, $|0S\rangle$ и $|-S\rangle$.

В новите означения (10.44) просто се превръща в

$$\langle+'+'\,|++\rangle=a^2.$$

Това всъщност е и амплитудата $\langle+T\,|+S\rangle$ за частици със спин 1. Сега нека предположим, че координатната система на вашия приятел, т. е. „примования“ прибор T, е завъртяна около *вашата* ос z на ъгъл φ; тогава от табл. 4.2 се получава

$$a=\langle+'\,|+\rangle=e^{i\,\varphi/2}.$$

Следователно според (10.44) амплитудата за спин 1 ще бъде

$$\langle+T\,|+S\rangle=\langle+'+'\,|++\rangle=(e^{i\,\varphi/2})^2=e^{i\,\varphi}. \qquad (10.45)$$

Сега вече разбирате как ще продължим по-нататък.

Но по-добре би било да проведем изчисленията в общия случай за всички състояния. Ако протонът и електронът в *нашата* система (системата S) са със спинове, насочени нагоре, то амплитудите за това в другата система (системата T) те да се окажат в едно от четирите възможни състояния, ще бъдат:

Таблица 10.4

Амплитуди за спин $^1/_2$

Означения, употребени в тази глава	Означения, употребени в гл. 4
$a=\langle+'\,\vert+\rangle$	$\langle+T\vert+S\rangle$
$b=\langle-'\,\vert+\rangle$	$\langle-T\vert+S\rangle$
$c=\langle+'\,\vert-\rangle$	$\langle+T\vert-S\rangle$
$d=\langle-'\,\vert-\rangle$	$\langle-T\vert-S\rangle$

$$
\begin{aligned}
&<+'+' \mid ++>=<+' \mid +>_e <+' \mid +>_p=a^2,\\
&<+'-' \mid ++>=<+' \mid +>_e <-' \mid +>_p=ab,\\
&<-'+' \mid ++>=<-' \mid +>_e <+' \mid +>_p=ba,\\
&<-'-' \mid ++>=<-' \mid +>_e <-' \mid +>_p=b^2.
\end{aligned}
\tag{10.46}
$$

След това можем да запишем състоянието $\mid ++>$ като линейна комбинация по следния начин:

$$
\mid ++>=a^2 \mid +'+'>+ab\{\mid +'-'>+\mid -'+'>\}+
+b^2 \mid -'-'>. \tag{10.47}
$$

Но сега забелязваме, че $\mid +'+'>$ представлява състоянието $\mid +T>$, че $\{\mid +'-'>+\mid -'+'>\}$ — това е точно $\sqrt{2}$, *умножено* със състоянието $\mid 0\ T>$ [вж. (10.41)] и че $\mid -'-'>=\mid -T>$. С други думи, можем да препишем (10.47) във вида:

$$
\mid +S>=a^2 \mid +T>+\sqrt{2}\,ab \mid 0\ T>+b^2 \mid -T>. \tag{10.48}
$$

По същия начин лесно се показва, че

$$
\mid -S>=c^2 \mid +T>+\sqrt{2}\,cd \mid 0\ T>+d^2 \mid -T>. \tag{10.49}
$$

С $\mid 0S>$ нещата са малко по-сложни, тъй като

$$
\mid 0S>=\frac{1}{\sqrt{2}}\{\mid +->+\mid -+>\}.
$$

Но всяко от състоянията $\mid +->$ и $\mid -+>$ може да бъде изразено чрез „примованите“ състояния:

$$
\begin{aligned}
&\mid +->=\\
&=ac \mid +'+'>+ad \mid +'-'>+bc \mid -'+'>+bd \mid -'-'>
\end{aligned}
\tag{10.50}
$$

и

$$
\begin{aligned}
&\mid -+>=\\
&=ac \mid +'+'>+bc \mid +'-'>+ad \mid -'+'>+\\
&+bd \mid -'-'>.
\end{aligned}
\tag{10.51}
$$

Като умножим сумата на (10.50) и (10.51) с $1/\sqrt{2}$, получаваме

$$
\mid 0S>=\frac{2}{\sqrt{2}}\,ac \mid +'+'>+\frac{ad+bc}{\sqrt{2}}\{\mid +'-'>+\mid -'+'>\}+
+\frac{2}{\sqrt{2}}\,bd \mid -'-'>.
$$

Оттук следва, че

$$
\mid 0S>=\sqrt{2}\,ac \mid +T>+(ad+bc) \mid 0\ T>+\sqrt{2}\,bd \mid -T>. \tag{10.52}
$$

Сега вече имаме всички необходими амплитуди. Коефициентите в (10.48), (10.49) и (10.52) са матричните елементи на $<jT \mid iS>$. Да ги запишем в матричен вид

$$
<jT \mid iS>=
\begin{array}{c}
\\
jT\downarrow
\end{array}
\overset{\overset{iS}{\rightarrow}}{\begin{pmatrix}
a^2 & \sqrt{2}\,ac & c^2\\
\sqrt{2}\,ab & ad+bc & \sqrt{2}\,cd\\
b^2 & \sqrt{2}\,bd & d^2
\end{pmatrix}}. \tag{10.53}
$$

Ние изразихме преобразованията на спин 1 чрез амплитудите a, b, c и d на преобразованията за спин 1/2.

Ако например системата T се завърти спрямо S на ъгъл α около оста y [вж. фиг. (3.6), стр. 25], амплитудите в табл. 10.4 ще бъдат просто матричните елементи $R_y(\alpha)$ от табл. 4.2.

$$a=\cos\frac{\alpha}{2}, \qquad b=-\sin\frac{\alpha}{2}, \tag{10.54}$$
$$c=\sin\frac{\alpha}{2}, \qquad d=\cos\frac{\alpha}{2}.$$

Като ги заместим в (10.53), ще получим формулите (3.38), които са дадени на стр. 27 без доказателство.

Но какво стана със състоянието $|IV>$?! Това е система със спин нула; следователно тя има само едно състояние — то *във всички координатни системи* е едно и също. Лесно може да проверим това; ако вземем разликата между (10.50) и (10.51) ще получим

$$|+-><-|-+>=(ad-bc)\{|+'-'><-|-'+'>\}.$$

Но $(ad-bc)$ е детерминантата на матрицата за спин 1/2 и тя просто е равна на единица. Така че получаваме

$$|IV'>=|IV>,$$

при всяка относителна ориентация на двете координатни системи.

11

Разпространение в кристална решетка

11-1. Състояния на електрона в едномерна решетка
11-2. Състояния с определена енергия
11-3. Състояния, зависещи от времето
11-4. Електрон в тримерна решетка
11-5. Други състояния в решетката
11-6. Разсейване от нерегулярности в решетката
11-7. Захват от нерегулярности в решетката
11-8. Амплитуди на разсейване и свързани състояния

11-1. Състояния на електрона в едномерна решетка

На пръв поглед може да ви се стори, че един електрон с не много голяма енергия преминава през твърд кристал изключително трудно. Атомите в кристала са разположени така, че техните центрове се намират един от друг само на няколко ангстрьома, а ефективният диаметър на атома при разсейване на електрони е примерно около 1 Å. С други думи, атомите в сравнение с разстоянията между тях са твърде големи и следователно може да се очаква, че средният свободен пробег между ударите ще бъде от порядъка на няколко ангстрьома, а това практически е равно на нула. Може да се очаква, че електронът почти веднага ще попадне в един или в друг атом. Независимо от това пред нас е едно най-обикновено природно явление: когато решетката е идеална, за електрона не представлява трудност да се придвижи плавно през кристала почти като през вакуум. Това е странен факт, но той е причина металите да пропускат така лесно електричеството; освен това той е дал възможност да се изобретят много твърде полезни устройства. Например благодарение на него транзисторът има свойството да имитира радиолампата. В радиолампата електроните се движат свободно през вакуум, в транзистора те също се движат свободно само че през кристалната решетка. Механизмът на това, което произлиза в транзистора, ще бъде описан в настоящата глава; следващата глава е посветена на приложенията на тези принципи в различните практически устройства.

Електронната проводимост на кристала е пример за едно твърде общо явление. Из кристала могат да странствуват не само електрони, но и други „обекти". Така възбудените състояния на атомите също могат да пътешествуват по аналогичен начин. Явлението, за което ние ще говорим сега, постоянно възниква при изучаване на физиката на твърдото тяло.

Ние вече разглеждахме много пъти примери на системи с две състояния. Да си представим този път електрон, който може да се намира в едно от двете възможни положения, като във всяко от положенията той се оказва в еднакво обкръжение. Да предположим също, че има определена амплитуда за преход на електрона от едното положение в другото — точно така, както в гл. 8 § 1 за молекулярния йон на водорода. Тогава законите на квантовата механика водят до следните резултати. За електрона възникват две възможни състояния с определена енергия, като всяко състояние може да бъде описано от амплитудата за пребиваване на електрона в едно от двете базисни положения. Във всяко от състоянията с определена енергия големините на тези две амплитуди са постоянни с течение на времето, а фазите им се изменят във времето с еднаква честота. От друга страна, ако електронът най-напред е бил в едно положение, с течение на времето той ще премине в друго, а още по-късно ще се върне в първото положение. Измененията на амплитудите приличат на движението на две свързани махала.

Да разгледаме сега идеална кристална решетка и да си въобразим, че електронът, имайки определена енергия, може да се разположи в някаква „ямичка" около определен атом на решетката. Да допуснем също, че електронът има някаква амплитуда за преход в друга ямичка, която се намира недалеч от първата около друг атом. Това напомня по нещо на система с две със-

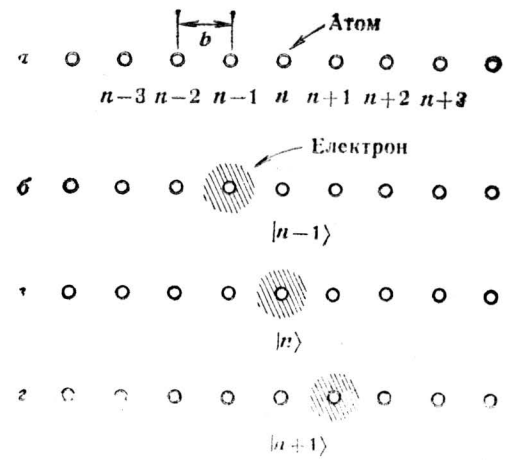
тояния, но с добавъчни усложнения. След като електронът достигне съседния атом, той може да премине на съвършено ново място или да се върне на изходната позиция. Всичко това прилича не толкова на две свързани махала, а по-скоро на система от *безкрайно много* махала, свързани помежду си. Това напомня по нещо за един от механизмите (изработен от редица пръчици, прикрепени към огъната телена жица), с помощта на който се демонстрира разпространението на вълни в първи курс.

Ако вие имате хармоничен осцилатор, свързан с друг хармоничен осцилатор, който от своя страна е свързан със следващ осцилатор, който и т. н., и ако вие създадете на дадено място някаква нерегулярност, тя ще започне да се разпространява така, както вълна по телена жица. Съвсем същото става и в този случай, когато поместите електрон около един от атомите, принадлежащ на дълга атомна верижка.

Като правило задачите по механика се решават най-просто на езика на стационарните вълни; това е по-просто, отколкото да се анализират последствията на отделен тласък. Тогава се появява някаква картина на отмествания, която се разпространява в кристала като вълна със зададена, фиксирана честота. Съвсем същото става с електрона, и то по същата причина, понеже в квантовата механика електронът се описва от подобни уравнения.

Но трябва да се помни едно нещо: амплитудата за това електронът да бъде на дадено място е *амплитуда*, а не вероятност. Ако електронът просто би се процеждал от едно място на друго като вода през дупчица, неговото поведение би било съвсем друго. Ако, да речем, ние свържем две бъчви с вода с помощта на тънка тръбица, по която водата от едната бъчва преминава капка по капка в другата, нивата на водата ще се изравнят по експоненциален закон. В случая на електрона имаме процеждане на амплитудата, а не монотонно преливане на вероятности. А едно от свойствата на имагинерния член (на множителя i в диференциалните уравнения на квантовата механика) е, че той изменя експоненциалното решение, като го превръща в трептеливо (колебателно). И всичко, което произлиза след това, съвсем не прилича на протичането на водата от едната бъчва в другата.

Сега ние искаме да направим анализ на квантовомеханичния случай количествено. Нека имаме едномерна система, представляваща дълга верижка от атоми. (Кристалът, разбира се, е тримерен, но физиката в двата случая е много близка; ако вие разберете едномерния случай, вие ще можете да разберете и това, което произлиза в случая на три измерения.) Ние искаме да знаем какво ще се случи, ако в тази линия от атоми се включи един електрон. Разбира се, в реалния кристал има много такива електрони. Но повечето от тях (в непроводящ кристал почти всички) заемат свое място в общата картина на движението, всеки се върти около своя атом и всичко се оказва напълно установено. А ние искаме да разсъждаваме за това, какво ще стане, ако във вътрешността се постави *излишен* електрон. Ние няма да мислим за това, какво поведение имат другите електрони, защото ще предполагаме, че за да се измени тяхната енергия, е необходима твърде много енергия за възбуждане. Ние искаме да добавим електрон и да създадем един вид слабо свързан отрицателен йон. Проследявайки поведението на *този излишен* електрон, ние правим приближение, понеже при това пренебрегваме вътрешния механизъм на атомите.



Фиг. 11.1. Базисни състояния на електрона в едномерна решетка

Ясно е, че този електрон може да премине към друг атом, пренасяйки на ново място отрицателния йон. Ние ще предположим (точно както в случая на електрон, „скачащ“ от протон на протон), че електронът може да „прескача“ с определена амплитуда от дадения атом към неговите съседи от всички страни.

Как да се опише такава система? Кои базисни състояния може да бъдат считани за разумни? Ако си спомните какво правехме, когато електронът имаше само две възможни позиции, вие ще можете да се досетите. Нека в нашата верижка всички

разстояния между атомите са еднакви и нека ние номерираме атомите под ред, както на фиг. 11.1, *а*. Едно базисно състояние имаме, когато електронът се намира около атом №6, друго базисно състояние – когато електронът се намира около атом №7 или около атом № 8 и т. н.; *n*-то базисно състояние може да се опише, като се каже, че електронът се намира около атом № *n*. Да означим това базисно състояние с $|n\rangle$. От фиг. 11.1 е ясно какво се разбира под трите базисни състояния

$$|n-1\rangle, \quad |n\rangle \quad \text{и} \quad |n+1\rangle.$$

С помощта на тези наши базисни състояния може да се опише всяко състояние $|\varphi\rangle$ на разглеждания едномерен кристал, като се зададат всички амплитуди $\langle n|\varphi\rangle$ за това, че състоянието $|\varphi\rangle$ се намира в едно от базисните състояния, т. е. амплитудата за това, че електронът е разположен близо до определен атом. Тогава състоянието $|\varphi\rangle$ може да се запише във вид на суперпозиция на базисните състояния:

$$|\varphi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\varphi\rangle. \tag{11.1}$$

Освен това ние искаме да предположим още, че когато електронът се намира близо до едии от атомите има някаква амплитуда за това той да проникне към атома отляво или към атома отдясно. Да вземем най-простия случай, когато се счита, че електронът може да проникне само към най-близките съседи, а до следващия съсед той може да дойде на два етапа. Да приемем, че амплитудата за това електронът да прескочи от единия атом към съседния е равна на $iA/\hbar$ (за единица време).

Да изменим временно означенията и амплитудата $\langle n|\varphi\rangle$, свързана с *n*-я атом, да означим с C_n. Тогава (11.1) приема вида

$$|\varphi\rangle = \sum_n |n\rangle C_n. \tag{11.2}$$

Ако вие знаехте всяка от амплитудите C_n в даден момент, вземайки квадратите на техните модули, можете да получите вероятността за това, че ще видите електрона, ако в този момент погледнете към атома *n*.

Но какво би станало малко по-късно? Ние предлагаме по аналогия с изучените вече системи с две състояния да съставим хамилтоновите уравнения за тази система във вид на уравнения от следния тип:

$$ih\frac{dC_n(t)}{dt} = E_0 C_n(t) - AC_{n+1}(t) - AC_{n-1}(t). \tag{11.3}$$

Първият коефициент отдясно E_0 физически означава енергията, която би имал електронът, ако той не би могъл да прониква от един атом към друг. (Съвсем не е важно какво ще разбираме под E_0; ние видяхме вече на много места, че реално това не означава нищо друго освен избор на нула върху оста на енергията.) Следващият член представлява амплитудата за това, че електронът ще проникне от $n+1$-та ямичка в *n*-та ямичка за единица време, а последният член означава амплитудата за проникване от $n-1$-та ямичка. Както обикновено, *A* се смята за константа (независеща от времето).

За пълното описание на поведението на произволно състояние $|\varphi\rangle$ трябва да имаме за всяка от амплитудите C_n по едно уравнение от типа (11.3). Тъй като ние имаме намерение да разглеждаме кристал с много голям брой атоми, нека допуснем, че състоянията са безкрайно много, атомите са наредени до безкрайност от двете страни. (При краен брой атоми се налага специално да се обръща внимание на това, какво става в краищата.) Щом обаче броят *N* на нашите базисни състояния е безкраен, то и системата хамилтонови уравнения е безкрайна! Ние ще запишем само част от нея:

$$i\hbar \frac{dC_{n-1}}{dt} = E_0 C_{n-1} - AC_{n-2} - AC_n$$

$$i\hbar \frac{dC_n}{dt} = E_0 C_n - AC_{n-1} - AC_{n+1} \qquad (11.4)$$

$$i\hbar \frac{dC_{n+1}}{dt} = E_0 C_{n+1} - AC_n - AC_{n+2}$$

. . .

. . .

. . .

11-2. Състояния с определена енергия

Ние можем вече да научим твърде много за електрона в решетката. Най-напред ще се опитаме да потърсим състояния с определена енергия. Както видяхме в предишните глави, това означава, че трябва да се намери такъв случай, когато всички амплитуди се изменят с една и съща честота, ако те въобще се изменят. Ние търсим решение от вида

$$C_n = a_n e^{-iE_n t/\hbar}. \qquad (11.5)$$

Комплексното число a_n показва каква е независещата от времето част на амплитудата, за това електронът да се намира около n-я атом. Ако заместим това пробно решение в уравнението (11.4), получаваме

$$Ea_n = E_0 a_n - Aa_{n+1} - Aa_{n-1}. \qquad (11.6)$$

Пред нас са безкрайно много уравнения за безкрайно много неизвестни a_n! Ситуацията е тежка!

Но ние знаем, че трябва само да се пресметне детерминантата. . . не, почакайте! Детерминантите са хубаво нещо, когато уравненията са две, три или четири. Но тук те са твърде много, дори безкрайно много и едва ли има полза от детерминантите. Не, по-добре е да се опитаме да решим тези уравнения направо. Първо, номерираме положенията на атомите; считаме, че n-ят атом се намира в точка x_n, а $n+1$-ят—в точка x_{n+1}. Ако разстоянието между атомите е равно на b (както на фиг. 11.1), то $x_{n+1} = x_n + b$. Ако изберем началото на координатната система в атома с номер нула, можем да запишем $x_n = nb$. Тогава уравнението (11.5) се записва във вида

$$C_n = a(x_n) e^{-iEt/\hbar}, \qquad (11.7)$$

а уравнението (11.6) се превръща в

$$Ea(x_n) = E_0 a(x_n) - Aa(x_{n+1}) - Aa(x_{n-1}). \qquad (11.8)$$

Като се възползуваме от това, че $x_{n+1} = x_n + b$, този израз може да се запише също във вида

$$Ea(x_n) = E_0 a(x_n) - Aa(x_n + b) - Aa(x_n - b). \qquad (11.9)$$

Това уравнение прилича малко на диференциално. То ни говори' че величината $a(x)$ в точка x_n е свързана със същата физическа величина в съседните точки $x_n \pm b$. (Диференциалното уравнение свързва стойността на функция в една точка с нейните стойности в безкрайно близки точки.) Може би тук ще са подходящи методите, които ние обикновено използуваме за решаване на диференциалните уравнения? Да опитаме.

Решенията на линейни диференциални уравнения с константни коефициенти винаги могат да бъдат изразени чрез експоненти. Опитваме и тук същото: в качеството на пробно решение избираме

$$a(x_n)=e^{ikx_n}. \tag{11.10}$$

Тогава (11.9) приема вид

$$Ee^{ikx_n}=E_0e^{ikx_n}-Ae^{ik(x_n+b)}-Ae^{ik(x_n-b)}. \tag{11.11}$$

Съкращаваме общия множител e^{ikx_n} и получаваме

$$E=E_0-Ae^{ikb}-Ae^{-ikb}. \tag{11.12}$$

Двата последни члена дават $2A\cos kb$, така че

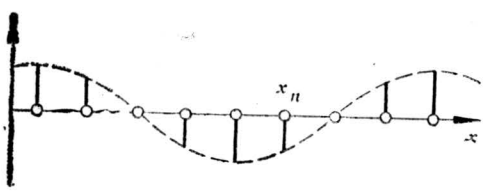
$$E=E_0-2A\cos kb. \tag{11.13}$$

Ние виждаме, че при *всеки* избор на константата k има решение, енергията на което се дава от това уравнение. В зависимост от k се получават различни възможни енергии и на всяка константа k съответствува отделно решение. Решенията са безкрайно много, но това не е удивително, тъй като ние работим с безкраен брой базисни състояния.

Да видим какъв е смисълът на тези решения. За всяко k уравнението (11.10) дава съответно a. Тогава амплитудите приемат вид

$$C_n=e^{ikx_n}\,e^{-(i/\hbar)Et}, \tag{11.14}$$

при което трябва да се помни, че енергията E също тъй зависи от k съгласно уравнението (11.13). Множителят e^{ikx_n} дава *пространствената зависимост* на амплитудите. Амплитудите при преход от атом към атом се менят синусоидално.



Фиг. 11.2. Изменение на реалната част на C_n в зависимост от x_n

При това имайте пред вид, че колебанията на амплитудата в пространството са *комплексни*, *модулът* ѝ близо до кой да е атом е един и същ, а фазата (в даден момент) получава отместване ikb от атом към атом. За да можем да видим какво става, нека поставим при всеки атом вертикална чертичка, равна по дължина на реалната част на амплитудата (фиг. 11. 2). Кривата, съединяваща краищата на тези вертикали (показана като пунктирана крива линия) е, разбира се, синусоида. Имагинерната част на C_n — това с също синусоидална функция, но тя е отместена по фаза с 90°, така че квадратът на модула (сумата от квадратите на реалната и мнимата част) за всички C е един и същ.

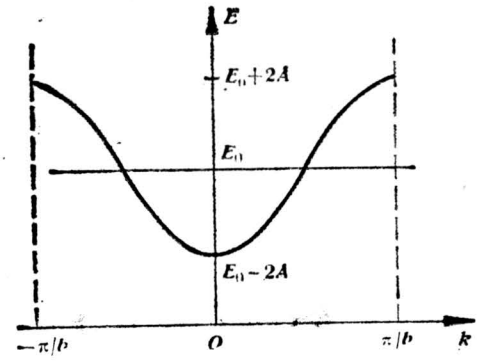
И тъй, избирайки k, ние получаваме стационарно състояние с определена енергия E. И във всяко едно от тези състояния вероятността електронът да се окаже около кой да е атом е една и съща, нито един атом няма някакви преимущества пред останалите. От атом към атом се мени само фазата. Фазите се менят още и с времето. От (11.14) следва, че реалната и имагинерната част се разпространяват в кристала като вълни и те са реалната и имагинерната част на израза

$$e^{i[kx_n-(E/\hbar)t]}. \tag{11.15}$$

Вълната може да се движи или към положителни, или към отрицателни x в зависимост от това, какъв знак се избира пред k.

Забележете, че ние предположихме, че поставеното в нашето пробно решение (11.10) число k е реално. Сега се вижда, защо в безкрайната верига от атоми така трябва и да бъде. Нека допуснем, че числото k е чисто имагинерно $-ik'$. Тогава амплитудата a_n би се изменяла по закона $e^{k'x_n}$, което би означавало, че амплитудата расте все повече с нарастване на x, или при отрицателно k', когато x приема големи отрицателни стойности. Такъв вид на решението би бил напълно удовлетворителен, ако веригата от атоми би свършвала някъде, но при безкрайна верига от атоми това не може да бъде физическо решение. То би довело до безкрайни амплитуди и следователно до безкрайни вероятности, които не могат да отразяват действителното положение на нещата. По-късно ние ще се срещнем с пример, когато и имагинерните k имат смисъл.

Зависимостта (11.3) между енергията E и вълновото число k е представена графически на фиг. 11.3. Както се вижда от тази фигура, енергията може да се мени от $E-2A$ при $k=0$ до E_0+2A при $k=\pm\pi/b$. Графиката е начертана за положителни A, при отрицателни A кривата трябва да се преобърне, но областта на изменение би останала същата. Съществено е това, че в определена област или „зона“ на енергии са допустими всички стойности на енергията; извън зоната енергия не може да има. От нашите предположения следва, че ако електронът в кристала е в стационарно състояние, неговата енергия не може да бъде извън тази зона.



Фиг. 11.3. Енергия на стационарните състояния като функция на параметъра k

Съгласно (11.13) малки k отговарят на по-ниски енергетични състояния $E\approx E_0-2A$. Когато k расте по големина (все едно в положителна или отрицателна страна), енергията най-напред расте, а след това при $k=\pm\pi/b$ достига максимум, както това е показано на фиг. 11.3. За k, по-големи от π/b, енергията отново би започнала да намалява. Но такива k няма смисъл да се разглеждат, те не водят до каквито и да е нови състояния, а просто повтарят онези състояния, които вече са се появили при по-малки k. Ето как можем да се убедим в това. Да разгледаме състоянието с най-малка енергия, за което $k=0$. Тогава при всички x_n коефициентът $a(x_n)$ ще бъде един и същ [вж. (11.10)]. Същата енергия би се получила и при $k=2\pi/b$. Тогава от (11.10) би следвало, че

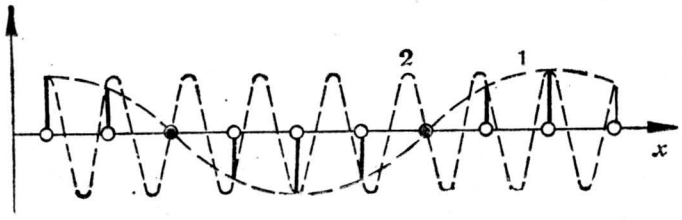
$$a(x_n)=e^{i(2\pi/b)x_n}.$$

Ако приемем, че началото на координатната ос е в точка x_0, можем да положим $x_n=nb$ и тогава $a(x_n)$ приема вид

$$a(x_n)=e^{2\pi in}=1,$$

т. е. състояние, което се описва от това $a(x_n)$ физически по нищо няма да се различава от състоянията с $k=0$. То не е особено решение.

В качеството на друг пример да вземем $k=\pi/4b$. Реалната част на $a(x_n)$ е представена на фиг. 11.4 от кривата 1. Ако k би било седем пъти по-голямо ($k=7\pi/4b$), реалната част на $a(x_n)$ би се изменяла така, както е показано на кривата 2. (Самата косинусоида няма смисъл, важни са само нейните стойности в *точките* x_n. Кривите са нужни просто за това да се види как всичко се мени). Вие виждате, че двете стойности на k дават еднакви амплитуди за всички x_n.



Фиг. 11.4. Две стойности на k, представляващи една и съща физическа ситуация. Кривата 1 — за $k=\frac{\pi}{4b}$, кривата 2 — за $k=\frac{7\pi}{4b}$

Изводът от всичко това е, че всички възможни решения на нашата задача се получават, ако k се вземе от някоя ограничена област. Ние ще изберем област от $-\pi/b$ до $+\pi/b$ (тя е показана на фиг. 11.3). В тази област енергията на стационарните състояния нараства с нарастване на абсолютната стойност на k.

Още една странична бележка за нещо, върху което заслужава да се поразсъждава. Представете си, че електронът може не само да прескача към най-близките съседи с амплитуда $iA/\hbar$, но че има още възможност с един скок да прескача и към *следващите зад* съседните атоми с някаква друга амплитуда $iB/\hbar$. Вие отново ще забележите, че решението може да се търси във вида $a_n=e^{ikx_n}$, този тип решения е универсален. Вие също ще ви-

дите, че стационарните състояния с вълново число k имат енергия $E_0 - 2A\cos kb - 2B\cos 2kb$. Това означава, че формата на кривата E като функция на k не е универсална, а зависи от онези частни допускания, при които се решава задачата. Това не е непременно косинусоида и тя дори не е обезателно симетрична относно хоризонталната ос. Но затова пък винаги е вярно, че кривата извън интервала $(-\pi/b, +\pi/b)$ се повтаря, така че не е нужно да се грижим за други стойности на k.

Нека сега да разгледаме по-внимателно какво става при малки k, когато вариациите на амплитудите между едно x_n и съседните са много малки. Ще отчитаме енергията от такова ниво, че да имаме $E_0 = 2A$; тогава в минимума на кривата на фиг. 11.3 имаме нулева енергия. За достатъчно малки k можем да напишем

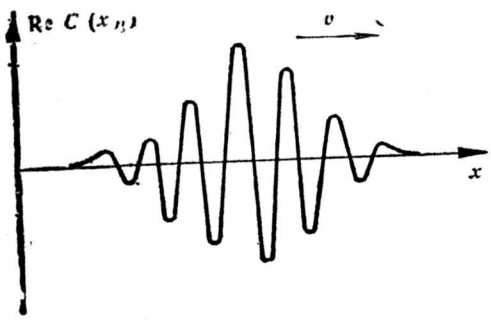
$$\cos kb \approx 1 - \frac{k^2 b^2}{2}$$

и зависимостта (11.13) се превръща в

$$E = Ak^2b^2. \qquad (11.16)$$

Получава се, че енергията на състоянието е пропорционална на квадрата на вълновото число, описващо пространствените вариации на амплитудите C_n.

11-3. Състояния, зависещи от времето



Фиг. 11.5. Реалната част на $C(x_n)$ като функция на x в случай на суперпозиция на няколко състояния с близки енергии

В този параграф ние искаме подробно да обсъдим поведението на състоянията в едномерната решетка. Ако амплитудата за това електронът да се окаже в точка x_n е равна на C_n, вероятността той да бъде намерен там ще бъде $|C_n|^2$. За *стационарните* състояния, които се описват от уравнението (11.12) тази вероятност е една и съща за всички x_n и не се мени с течение на времето. Как да се представи едно такова положение на нещата, което грубо би могло да се опише, като се каже, че електрон с дадена енергия е съсредоточен в определена област, така че по-вероятно е той да бъде намерен на едно определено място, отколкото на друго? Това може да се осъществи чрез суперпозиция на няколко решения, подобни на (11.12), но с леко различаващи се стойности на k и следователно с различни енергии. Тогава поне при $t=0$ вследствие на интерференцията на различните слагаеми амплитудата C_n ще зависи от местоположението точно така, както в случая на възникване на биене, когато имаме смес от вълни с различна дължина [вж. гл. 48 (том I)]. Значи може да се формира така „вълнов пакет", че в него да преобладава вълново число k_0, но в него ще има и други вълнови числа, близки до k_0.[1]

В нашата суперпозиция от стационарни състояния амплитудите с различни k ще представят състояния с едва различаващи се енергии и следователно с едва различаващи се честоти; поради това интерференционната картина на сумарното C_n също ще се мени с времето, възниква картина на „биене". Както видяхме в гл. 48 (том I), върховете на биенето (местата, където $|C(x_n)|^2$ има най-голяма стойност) ще започнат да се движат по x с течение на времето; скоростта на тяхното движение ние нарекохме „групова". Ние намерихме, че тази групова скорост е свързана със зависимостта на честотата ω от k чрез формулата

$$v_{\text{груп}} = \frac{d\omega}{dk} \qquad (11.17)$$

всичко това се отнася в същата степен и за нашия случай. Състоянието на електрона, което има вид на „струпване", т. е. състоянието, за което C_n се мени в пространството така, както при вълновия пакет на фиг. 11.5, ще се движи по дължината на нашия едномерен „кристал" с бързина v, равна на $\frac{d\omega}{dk}$, където

[1] Само не се старайте да правите пакета твърде тесен.

$\omega = E/\hbar$. Заместваики (11.16) вместо E, получаваме

$$v = \frac{2Ab^2}{\hbar} k. \tag{11.18}$$

С други думи, електроните се движат в кристала с бързина, пропорционална на най-характерното k. Тогава, съгласно (11.16), енергията на такъв електрон е пропорционална на квадрата на неговата скорост, *той има поведение, подобно на поведението на класическа частица.* Засега ние разглеждаме всичко в толкова едър мащаб, че никакви тънкости в строежа не могат да се различат и нашата квантовомеханична картина води към същите резултати, както и класическата физика.

Наистина, ако от (11.18) намерим k и го заместим в (11.16), ще получим

$$E = \frac{1}{2} m_{\text{еф}} v^2, \tag{11.19}$$

където $m_{\text{еф}}$ е константа. Добавъчната „енергия на движението" на електрона в пакета зависи от скоростта точно така, както в случая на класическа частица. Константата $m_{\text{еф}}$, наричана „ефективна маса", се дава с израза

$$m_{\text{еф}} = \frac{\hbar^2}{2Ab^2}. \tag{11.20}$$

Забележете, че може да се напише

$$m_{\text{еф}} v = \hbar k. \tag{11.21}$$

Ако ние решим да наричаме произведението $m_{\text{еф}} v$ „импулс", тогава този импулс ще бъде свързан с вълновото число точно така, както и в случай на свободна частица.

Не забравяйте, че $m_{\text{еф}}$ няма нищо общо с реалната маса на електрона. Тя може да бъде съвсем друга, макар че трябва да се каже, че в реалните кристали често се случва нейният порядък да се окаже примерно същият (2 пъти или, да речем, 20 пъти по-голяма от масата на електрона в празното пространство).

Ние с вас току-що разкрихме една поразителна тайна — именно как електронът в кристал (например вкаран в германий добавъчен електрон) може да премине през целия кристал, може да лети в него съвсем свободно дори ако му се наложи да се сблъсква по пътя си с всички атоми. Това се получава благодарение на обстоятелството, че амплитудата, „преливайки" се от един атом към друг, прокарва път на електрона през кристала. Ето защо едно твърдо тяло може да бъде проводник на електричество.

11-4. Електрон в тримерна решетка

Още малко за това, как може да се приложат същите идеи за да се разбере какво става с електрона в случай на три измерения. Резултатите се оказват твърде сходни. Нека имаме правоъгълна решетка от атоми с разстояния a, b, c в трите направления. (Ако вие харесвате повече кубическа решетка, приемете всичките разстояния равни едно на друго.) Да предположим също че амплитудата за прескачане към съседа по направлението x е $iA_x/\hbar$; амплитудата за прескачане по направлението y е $iA_y/\hbar$, а амплитудата за прескачане по направлението z е $iA_z/\hbar$. Как да се опишат базисните състояния? Както и в едномерния случай, едно базисно състояние имаме, когато електронът се намира около атом с координати x, y, z, където (x, y, z) е една от точките на решетката. Ако изберем началото на координатната система в един от атомите, координатите на всички тези точки се задават с формулите

$$x = n_x a, \quad y = n_y b, \quad z = n_z c,$$

където n_x, n_y, n_z са три цели числа. Вместо да поставяме при x, y, z съответен номер, просто ще пишем x, y, z, като имаме пред вид, че те приемат само такива стойности, които съответствуват на възлите на решетката. И тъй определено базисно състояние се изобразява със символа $|$ електрон в $x, y, z>$, а амплитудата за това, че електрон в някакво състояние $|\psi>$ ще се окаже в това базисно състояние е $C(x, y, z)=<$електрон в $x, y, z \mid \psi>$.

Както и преди амплитудите $C(x, y, z)$ могат да се изменят с течение на времето. При нашите предположения хамилтоновите уравнения задължително трябва да имат следния вид:

$$i\hbar \frac{dC(x, y, z)}{dt}=E_0 C(x, y, z)-A_x C(x+a, y, z)-A_x C(x-a, y, z)$$
$$-A_y C(x, y+b, z)-A_y C(x, y-b, z)$$
$$-A_z C(x, y, z+c)-A_z C(x, y, z-c). \qquad (11.22)$$

Макар че това уравнение изглежда сложно, вие, разбира се, веднага ще разберете откъде се взема всяко слагаемо.

Отново да опитаме да намерим стационарното състояние, в което всички C се изменят еднакво с течение на времето. И отново решението е експонента от вида

$$C(x, y, z)=e^{-i(E/\hbar)t} e^{i(k_x x+k_y y+k_z z)}. \qquad (11.23)$$

Ако вие заместите това в (11.22), ще видите, че то напълно подхожда; необходимо е само енергията E да е свързана с k_x, k_y, k_z по следния начин:

$$E=E_0-2A_x \cos k_x a-2A_y \cos k_y b-2A_z \cos k_z c. \qquad (11.24)$$

Сега енергията зависи от *три* вълнови числа k_x, k_y, k_z, които между впрочем са компоненти на тримерния вектор **k**. И наистина (11.23) може да се препише във векторни означения:

$$C(x, y, z)=e^{-iEt/\hbar} e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \qquad (11.25)$$

Амплитудата се мени като комплексна *плоска вълна*, която се разпространява в тримерното пространство по посока на **k** с вълново число

$$k=(k_x^2+k_y^2+k_z^2)^{1/2}.$$

Енергията, свързана с тези стационарни състояния, зависи от трите компоненти на **k** по сложен начин, като се подчинява на уравнението (11.24). Характерът на изменението на E зависи от относителните знаци и величините A_x, A_y и A_z. Ако всички членове на тази тройка са положителни и ако не се интересуваме само от малки **k**, зависимостта се оказва сравнително проста.

Разлагайки косинуса както преди [вж. (11.16)], ние сега стигаме до израза:

$$E=E_{\text{мин}}+A_x a^2 k_x^2+A_y b^2 k_y^2+A_z c^2 k_z^2. \qquad (11.26)$$

В случай на проста кубическа решетка с разстояние a между възлите логично е да се очаква, че и A_x, A_y и A_z са равни помежду си (да речем равни на A), така че би се получило

$$E=E_{\text{мин}}+Aa^2(k_x^2+k_y^2+k_z^2), \qquad (11.27)$$

или

$$E=E_{\text{мин}}+Aa^2k^2.$$

А това съвпада с (11.16). Повтаряйки същите разсъждения, както тогава, ние бихме дошли до заключението, че електронният пакет в случай на *три* измерения (съставен като суперпозиция от множество състояния с почти еднакви енергии) също се движи по подобие на класическа частица, притежава определена ефективна маса.

В кристал не с кубическа, а с по-нисък тип симетрия (или дори в кубически кристал, но в който състоянието на електрона около атома е несиметрично) трите коефициента A_x, A_y и A_z са различни. Тогава „ефективната маса“ на електрона, съсредоточен в тясна област, зависи от *направлението, по което се движи.* Може например да се окаже, че електронът има една енергия при движение по направлението x и друга при движение по направлението y. (Детайлно това положение на нещата се описва с помощта на понятието „тензор на ефективната маса“.)

11-5. Други състояния в решетката

Съгласно (11.24) състоянията на електрона, за които ние говорихме, могат да имат енергии само в определена енергетична „зона“, простираща се от най-малката енергия

$$E_0 - 2(A_x + A_y + A_z)$$

до най-голямата

$$E_0 + 2(A_x + A_y + A_z).$$

Други енергии също са възможни, но те принадлежат към друг клас състояния. За тези състояния, за които говорихме по-рано, ние избирахме като базисни състояния такива, когато електронът в атома на кристала се намира в някое определено състояние, да речем в състояние с най-ниска енергия.

Аковие имате атом, намиращ се в празно пространство, и добавите към него електрон с цел да се получи йон, този йон може да се образува по много начини. Електронът може да се разположи така, че да образува състояние с най-ниска енергия или така, че да образува едно или друго от множеството възможни „възбудени състояния“ на йона, всяко с определена енергия, която е по-голяма от най-малката стойност. Същото може да се случи и в кристала. Да допуснем, че енергията E_0, която ние използувахме по-горе, съответствува на базисни състояния, представящи йони с най-ниски възможни енергии. Но ние можем да си въобразим също нова съвкупност от базисни състояния, в които електронът се разполага иначе около n-я атом: той образува едно от възбудените състояния на йона, така че енергията E_0 сега вече е малко по-голяма. Както и по-рано, има някаква амплитуда A (различна от предишната) за това електронът да прескочи от своето възбудено състояние около един атом в същото възбудено състояние около съседния атом. И целият анализ се провежда както по-рано; ние ще забележим зона от възможни енергии, съсредоточени около някоя по-висока енергия. Въобще такива зони може да има много и всяка ще отговаря на определено ниво на възбуждане.

Мислими са и други възможности. Може да съществува някаква амплитуда, за това електронът да прескача от възбудено състояние около даден атом в невъзбудено състояние около следващия атом. (Това се нарича взаимодействие между зоните). Математическата теория става все по-сложна, когато вие вземате под внимание все повече зони и добавяте все повече коефициенти на просмукване между различните състояния. Никакви нови идеи не са нужни; но уравненията, както ние видяхме от нашия прост пример, бързо се усложняват.

Следва още да се забележи, че за различните коефициенти, такива като появяващата се в теорията амплитуда A, може да се каже само твърде малко. Те, като правило, много трудно се пресмятат и в практическите случаи за тези параметри теоретически е известно съвсем малко; в едни или други реални случаи се налага техните стойности да се вземат от опита.

Има и други случаи, в които цялата физика и цялата математика почти точно съвпадат с това, което ние знаем за електрона, движещ се в кристал, но в които движещият се „обект“ е съвсем

друг. Да си представим например, че като изходен кристал (или по-добре да се каже в качеството на линейна решетка) ние сме имали верига неутрални атоми, всеки от които има много слаба връзка с външния електрон. Сега да си представим, че ние отстраняваме един електрон. Кой от атомите сме лишили от електрон? Нека C_n е амплитудата за това, че електронът е *изчезнал* от околността на атома, намиращ се в точка x_n. Въобще има някаква амплитуда A за това един електрон от даден атом, да речем n — 1-я, да прескочи към съседния, n-тия атом, оставяйки своя, n — 1-я атом без електрон. Това е съвсем същото, ако кажем, че „електронният недостиг" има амплитуда A за това да се прехвърли от n-тия към n — 1-я атом. Лесно е да се види, че уравненията ще се окажат същите, както по-рано, но, разбира се, не е обезателно самите амплитуди A да останат предишните. Ние отново ще стигнем до същите формули за енергетичните нива, за вероятностните „вълни", които се разпространяват в кристала с групова скорост, определена от (11.18), за ефективната маса и т. н. Само че сега тези вълни описват поведението на *недостигащия* електрон, който се нарича още „дупка". Можем да се убедим, че зарядът на тази частица ще изглежда положителен. В следващата глава ние ще разкажем малко по-подробно за тези дупки.

Друг пример. Да си представим верига *неутрални* атоми, един от които се намира във възбудено състояние, т. е. с по-висока, отколкото в нормалното състояние енергия. Нека C_n е амплитудата, затова n-тия атом да е възбуден. Той може да взаимодейства със съседен атом, предавайки му своята енергия на възбуждане, след което се връща в основното състояние. Да означим амплитудата на този процес с $iA/\hbar$. Вие виждате, че отново се повтаря същата математика. Но сега това, което се движи, се нарича *екситон*. То има поведение на неутрална „частица", която се движи през кристала и носи със себе си енергия на възбуждане. Съществуването на такова движение може да се предполага в някои биологични процеси — такива, като зрение или фотосинтеза. Изказвана е догадка, че поглъщането на светлина в ретината създава „екситон", който се движи през някаква периодична структура (такава, като слоевете пръчици, описани в гл. 36/том I/; вж. също фиг. 36.5) и се акумулира в някакви специални станции, където тази енергия се използува за възбуждане на химична реакция.

11-6. Разсейване от нерегулярности в решетката

Сега ние искаме да разгледаме единичен електрон в неидеален кристал. Нашият първоначален анализ ни доведе до извода, че за идеалните кристали и проводимостта е идеална, че електроните могат да преминават през кристала без триене така, както през вакуума. Една от най-важните причини, способна да прекрати вечното движение на електрона, е несъвършенството на кристала, някаква нерегулярност в него. Да допуснем, че някъде в кристала не достига един атом, или да предположим, че някой е поставил на мястото, предназначено за даден атом, съвсем не този атом, който се полага, а друг, така че на това място не съвсем всичко е така, както на останалите места. Да речем, друга енергия E_0 или друга амплитуда A. Как тогава може да се опише всичко, което става?

За определеност нека да се обърнем към едномерния случай и да допуснем, че атом с номер „нула" е „замърсяващият" атом, „примесеният" атом и че той има не такава енергия E_0, както при другите атоми. Да означим тази енергия с E_0+F. Какво става? За електрона, който достига до „нулевия" атом, има някаква вероятност за това той да се разсее назад. Ако вълновият пакет, разпространявайки се в кристала, достигне мястото, където всичко е малко по-иначе, една част от него ще продължи да се разпространява напред, а друга ще отскочи назад. Да се анализира такъв случай, като се използува вълнов пакет, е много тру-

дно, понеже всичко се мени във времето. Много по-лесно е да се работи с решения във вид на стационарни състояния. Ето защо ние ще се обърнем към стационарните състояния; ще видим, че те могат да бъдат съставени от непрекъснати вълни, състоящи се от две части—преминала и отразена. В случай на три измерения ние бихме нарекли отразената част разсеяна вълна, тъй като тя би се разпространявала във всички посоки.

Тръгваме от система от уравнения, подобна на (11.6) с едно само изключение; уравнението при $n=0$ не прилича на останалите. Петте уравнения за $n=-2, -1, 0, +1$ и $+2$ изглеждат така:

$$\begin{aligned}
&\cdot \qquad \cdot \qquad \cdot \\
&\cdot \qquad \cdot \qquad \cdot \\
&\cdot \qquad \cdot \qquad \cdot \\
&Ea_{-2} = E_0 a_{-2} - Aa_{-1} - Aa_{-3} \\
&Ea_{-1} = E_0 a_{-1} - Aa_0 - Aa_{-2} \\
&Ea_0 = (E_0+F)\, a_0 - Aa_1 - Aa_{-1} \qquad (11.28) \\
&Ea_1 = E_0 a_1 - Aa_2 - Aa_0 \\
&Ea_2 = E_0 a_2 - Aa_3 - Aa_1. \\
&\cdot \qquad \cdot \qquad \cdot
\end{aligned}$$

Разбира се, ще има и други уравнения при $|n|>2$. Те ще изглеждат точно така, както (11.6).

За да не нарушаваме общността, ние всъщност би трябвало да пишем различни A в зависимост от това, дали електронът прескача *към* атома с номер „нула“ или *от* „нулевия“ атом, обаче главните черти на всичко, което наистина има място вие ще видите и от опростения пример, когато всички A са равни.

Изразът (11.10) за величините a, както и преди, ще бъде решение на всички уравнения освен на уравнението за „нулевия“ атом (за него това решение е неподходящо). На нас ни трябва друго решение, което ще констатираме по следния начин: Уравнението (11.10) представлява вълна, разпространяваща се по оста x в положителна посока. Вълна, разпространяваща се по x в обратна посока, също подхожда в качество на решение. За този тип решение ние бихме написали

$$a(x_n)=e^{-ikx_n}.$$

Най-общото решение на уравнението (11.6) би било комбинация на вълни, разпространяващи се напред и назад

$$a_n=\alpha\, e^{ikx_n}+\beta\, e^{-ikx_n}. \qquad (11.29)$$

Това решение представлява комплексна вълна с амплитуда α за частта, разпространяваща се по посока на $+x$, и с амплитуда β за частта, разпространяваща се по посока на $-x$.

Сега да отправим поглед към системата от уравнения за нашата нова задача, т. е. към (11.28) плюс също такива уравнения за останалите атоми. Уравненията, в които влизат a_n с $n\leqslant -1$, имат за решение (11.29) при условие, че k е свързано с E и константата на решетката b чрез равенството

$$E=E_0-2A\cos kb. \qquad (11.30)$$

Физическият смисъл на това е следният: „падащата“ вълна с амплитуда α се приближава към атома „нула“ (или към „разсейващия“ център) отляво, а „разсеяната“, или „отразената“ вълна с амплитуда β се разпространява в обратна посока, т. е. наляво. Без да нарушаваме общността, можем да положим амплитудата α на падащата вълна, равна на единица. Тогава амплитудата β ще бъде в общия случай комплексно число.

Същото може да се каже и за решенията a_n при $n\geqslant 1$. Коефициентите могат да станат други, така че би следвало да пишем

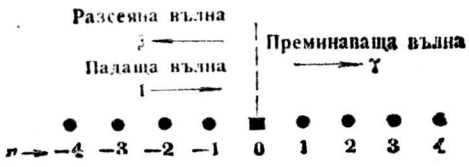
$$a_n=\gamma\, e^{ikx_n}+\delta\, e^{-ikx_n} \quad \text{за } n\geqslant 1. \qquad (11.31)$$

Тук γ е амплитудата на вълната, разпространяваща се надясно, а

δ — амплитудата на вълната, идваща отдясно. Ние искаме да разгледаме такъв *физически* случай, когато първоначално се разпространява вълна само отляво и зад разсейващия център (примесния атом) има само „преминала" вълна. Затова ще търсим решение, в което $\delta=0$. И тъй ние ще се опитаме да удовлетворим всички уравнения за a_n освен средните три уравнения на системата (11.28) с помощта на следните пробни решения:

$$a_n \text{ (за } n<0)=e^{ikx_n}+\beta e^{-ikx_n}$$
$$a_n \text{ (за } n>0)=\gamma e^{ikx_n}. \tag{11.32}$$

Физическият случай, за който става дума, е представен схематично на фиг. 11.6.



Фиг. 11.6. Вълни в едномерна решетка с един „примесен" атом с номер $n=0$

Използувайки формулите (11.32) за a_{-1} и a_{+1}, ние можем да намерим от средните три уравнения на системата (11.28) a_0 и двата коефициента β и γ. По такъв начин ние ще намерим пълното решение. Трябва да се решат трите уравнения (полагаме $x_n=nb$):

$$\begin{aligned}
&(E-E_0)\{e^{ik(-b)}+\beta e^{-ik(-b)}\}=-A\{a_0+e^{ik(-2b)}+\beta e^{-ik(-2b)}\}\\
&(E-E_0-F)a_0=-A\{\gamma e^{ikb}+e^{ik(-b)}+\beta e^{-ik(-b)}\}\\
&(E-E_0)\gamma e^{ikb}=-A\{\gamma e^{ik(2b)}+a_0\}.
\end{aligned} \tag{11.33}$$

Спомнете си, че (11.30) изразява E чрез k. Заместете този израз за E в уравненията и вземете под внимание, че

$$\cos x=\frac{1}{2}(e^{ix}+e^{-ix}),$$

тогава от първото уравнение се получава

$$a_0=1+\beta, \tag{11.34}$$

а от третото

$$a_0=\gamma. \tag{11.35}$$

Тези резултати се съгласуват един с друг само тогава, когато

$$\gamma=1+\beta. \tag{11.36}$$

Това уравнение ни показва, че преминалата вълна (γ) е просто изходната падаща вълна (1) плюс добавъчната вълна (β), равна на отразената. Това не винаги е така; оказва се обаче, че при разсейване на падащата вълна само от един атом това е така. Ако вие разглеждате цяла група примесени атоми, тогава величината, която се добавя към разпространяващата се напред вълна, не би била непременно равна на отразената вълна.

Ние можем да получим амплитудата β на отразената вълна, като си послужим със средното от уравненията (11.33); оказва се, че

$$\beta=\frac{-F}{F-2iA\sin kb}. \tag{11.37}$$

Така ние получаваме пълното решение на системата уравнения за решетка с един примесен атом.

Вие може да се учудите на това, че преминаващата вълна се оказва „по-висока" от падащата, ако се съди по равенството (11.34). Но спомнете си, че β и γ са комплексни числа и че броят на частиците във вълната (или, по-добре да се каже, вероятността да открием частица на дадено място) е пропорционална на квадрата от модула на амплитудата. В действителност „запазването на броя на електроните" ще бъде изпълнено само при условие, че

$$|\beta|^2+|\gamma|^2=1. \tag{11.38}$$

Опитайте се да покажете, че за нашето решение това е точно така.

11-7. Захват от нерегулярности в решетката

Има и друг интересен случай. Той може да възникне, когато F е отрицателно число. Ако енергията на електрона в примесния атом (при $n=0$) е по-малка, отколкото където и да е на друго място, електронът може да се окаже захванат от този атом. Иначе казано, ако енергията E_0+F стои по-ниско от най-долната част на зоната (по-малка е от E_0-2A), тогава електронът може да се окаже „заловен“ в състояние с $E<E_0-2A$. От всичко, което ние правихме досега, такова решение не може да се получи. Но това решение може да се получи, ако допуснем, че в пробното решение (11.15) величината k може да приеме имагинерни стойности. Да положим $k=i\varkappa$. За $n<0$ и за $n>0$ отново ще имаме различни решения. За $n<0$ допустимото решение би могло да има вид

$$a_n \text{ (при } n<0)=ce^{+\varkappa x_n}. \tag{11.39}$$

Пред показателя на експонентата ние избираме плюс; в противен случай амплитудата би станала безкрайно голяма при големи отрицателни n. По същите причини допустимото решение за $n>0$ би имало вид

$$a_n \text{ (при } n>0)=c'e^{-\varkappa x_n}. \tag{11.40}$$

Ако заместим тези пробни решения в (11.28), те ще удовлетворят всички уравнения освен средните три, при условие че

$$E=E_0-A(e^{\varkappa b}+e^{-\varkappa b}). \tag{11.41}$$

А тъй като сумата на тези две експоненти винаги е по-голяма от 2, тази енергия се оказва извън пределите (по-ниско) на обикновената зона. Но ние точно това търсим. Останалата тройка уравнения може да бъде удовлетворена, ако вземем $c=c'$ и $\varkappa$ изберем така, че да е изпълнено условието

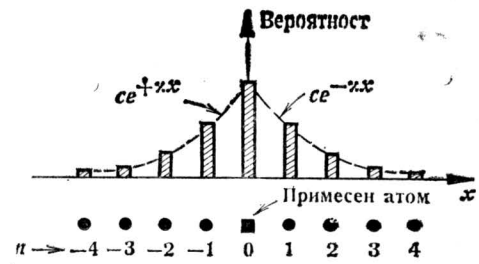
$$A(e^{\varkappa b}-e^{-\varkappa b})=-F. \tag{11.42}$$

Съпоставяйки това уравнение с (11.41), намираме енергията на захванатия електрон

$$E=E_0-\sqrt{4A^2+F^2}. \tag{11.43}$$

Захванатият електрон има една-единствена енергия (а не цяла зона от енергии); тя е разположена по-ниско от зоната на проводимост.

Забележете, че амплитудите (11.39) и (11.40) не осигуряват стопроцентова вероятност електронът да стои в примесния атом. Вероятността той да се окаже при някои от съседните атоми се дава от квадрата на съответната амплитуда. Нейното изменение е отразено чрез височината на стълбчетата на фиг. 11.7 (при определен набор от параметри). Електронът може да се окаже около примесния атом. За съседните атоми вероятността намалява експоненциално с отдалечаването от примесния атом. Това е нов пример за „проникване през бариера“. От гледна точка на класическата физика електронът не би имал необходимата енергия, за да се отдалечи от енергетическата „дупка“ около захватния център. Но квантовомеханически той може да се предвижи донякъде, макар и не много далеч.



Фиг. 11.7. Относителни вероятности за попадане на захванатия електрон в атомните възли, намиращи се в околността на примесния атом — уловка

11-8. Амплитуди на разсейване и свързани състояния

Нашият последен пример може да бъде използуван в качеството на илюстрация при изучаването на един въпрос, който в наше време е много важен за физиката на частиците с високи енергии. Става дума за връзката между амплитудите на разсейване и свързаните състояния. Да предположим, че сме открили (с помощта на опити и теоретичен анализ) как пионите се разсейват от протони. След това се открива нова частица и някой иска да разбере дали тя не е просто комбинация на пион и протон, обе-

динени в едно свързано състояние (подобно на това, както електронът и протонът образуват водороден атом, когато са свързани помежду си). Под свързано състояние ние разбираме такава комбинация, енергията на която е по-малка от енергията на двете частици в свободно състояние.

Има обща теория, според която, ако амплитудата на разсейването се екстраполира (или на математически език, ако се „продължи аналитично“) за енергии извън разрешената зона, при такава енергия, при която амплитудата става безкрайно голяма, възниква свързано състояние. Физическата причина за това е следната: Свързаното състояние е състояние, при което имаме вълни само около някоя точка; то не се поражда от никаква начална вълна и просто съществува само по себе си. Относителната пропорция между т. нар. „разсеяни“ или създадени вълни и вълните, „изпращани навътре“, е равна на безкрайност. Тази идея може да се провери в нашия пример. Да изразим нашата разсеяна амплитуда (11.37) направо чрез енергията E на разсеялата се частица (а не чрез k). Уравнението (11.30) може да се препише във вида

$$2A \sin kb = \sqrt{4A^2 - (E - E_0)^2},$$

затова разсеяната амплитуда е

$$\beta = \frac{-F}{F - i\sqrt{4A^2 - (E - E_0)^2}}. \tag{11.44}$$

От извода на формулата следва, че тя може да се прилага само за реални състояния — за такива състояния, енергията на които попада в енергетичната зона $E = E_0 \pm 2A$. Но представете си, че ние сме забравили за това и сме разширили нашата формула и за „нефизическите“ области, където $|E - E_0| > 2A$. За тези „нефизически“ области можем да пишем[1]

$$\sqrt{4A^2 - (E - E_0)^2} = i\sqrt{(E - E_0)^2 - 4A^2}.$$

Тогава „амплитудата на разсейването“ (каквото и да означава този израз) е равна на

$$\beta = \frac{-F}{F + \sqrt{(E - E_0)^2 - 4A^2}}. \tag{11.45}$$

Сега задаваме въпрос: съществува ли такава енергия E, при която амплитудата β става безкрайна (т. е. при която изразът за β има „полюс“)? Да, съществува само при условие, че F е отрицателно; тогава знаменателят (11.45) се обръща в нула при

$$(E - E_0)^2 - 4A^2 = F^2,$$

т. е. при

$$E = E_0 \pm \sqrt{4A^2 + F^2}.$$

При знак минус се получава точно това, което ни дава (11.43) за енергията на захванатия електрон.

А как стои въпросът със знака плюс? Той води до енергия, която стои *по-високо* от разрешената енергетична зона. И наистина съществува друго свързано състояние, което ние пропуснахме при решаването на (11.28). Сега ви се предоставя възможността да намерите сами енергията и амплитудата a_n на това свързано състояние.

Един от ключовете (при това от най-надеждните) за разгадаване експерименталните наблюдения при изследване на нови и странни частици е това съотношение между закона за разсейване и свързаните състояния.

---

[1] Знакът на корена, който тук би трябвало да се постави, е чисто технически въпрос, свързан с допустимите знаци на $\varkappa$ в (11.39) и (11.40). Ние тук няма да вникваме в тези подробности.

12

Полупроводници

12-1. Електрони и дупки в полупроводниците[1]

12-1. Електрони и дупки в полупроводниците
12-2. Примесни полупроводници
12-3. Ефект на Хол
12-4. *p-n*-преходи между полупроводниците
12-5. Изправяне от *p-n*-прехода между два полупроводника
12-6. Транзистор

Едно от най-забележителните и вълнуващи открития през последните години беше приложението на физиката на твърдото тяло в техническата разработка на редица електрически устройства, каквито са транзисторите. Изучаването на полупроводниците доведе до откриването на техните полезни свойства и до множество практически приложения. В тази област всичко се изменя така бързо че това, което ви се разказва днес, след една година може да се окаже вече невярно или във всеки случай непълно. И съвсем ясно е, че след като изучим по-подробно тези вещества, с течение на времето ние ще бъдем в състояние да осъществим много по-удивителни неща. Материалът на тази глава няма да ви потрябва за разбирането на следващите глави, но за вас вероятно ще бъде интересно да се убедите, че поне някои неща от всичко онова, което вие вече изучихте, все пак е свързано с практиката.

Известни са много полупроводници, но ние ще се ограничим с тези, които днес се прилагат най-широко в техниката. При това те са изучени и по-добре от другите, така че, запознавайки се с тях, ние до известна степен ще разберем и много други. Най-широко прилаганите в наше време полупроводникови вещества са силиций и германий. Тези елементи кристализират в решетка от типа на елмаза—в такава кубическа структура, в която атомите имат четворна (тетраедрална) връзка със своите най-близки съседи. При много ниски температури (близо до абсолютната нула) те са изолатори, макар че при стайна температура те имат известна малка електропроводимост. Това не са метали и се наричат *полупроводници*.

Ако по някакъв начин в кристала на силиция или германия, поставени при ниска температура, въведем добавъчен електрон, възниква това, което вече е описано в предходната глава. Такъв електрон започва да блуждае из кристала, прескачайки от едно място на друго, от атом на атом по възлите на кристалната решетка. Ние разгледахме поведението на атома само в правоъгълна решетка, а за реалната решетка на силиция или германия уравненията биха били други. Но всичко съществено може да стане ясно и от резултатите за правоъгълна решетка.

Както видяхме в гл. 11, енергиите на тези електрони могат да се намират само в определена ивица от стойности, наречена *зона на проводимост*. В тази зона енергията е свързана с вълновото число κ на амплитудата на вероятността C [вж. (11.24)] чрез формулата

$$E = E_0 - 2A_x \cos \kappa_x a - 2A_y \cos k_y b - 2A_z \cos k_z c. \qquad (12.1)$$

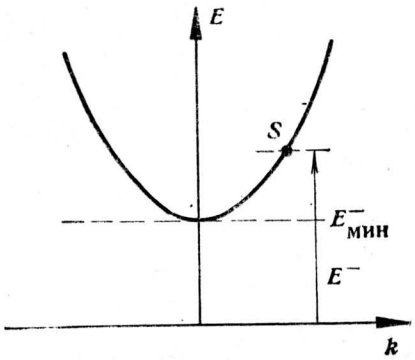
Различните A са амплитудите на скоковете в направленията x, y и z, а a, b и c са константите на решетката (интервалите между възлите) в тези направления.

За енергия около долния край на зоната формулата (12.1) може приблизително да се запише така

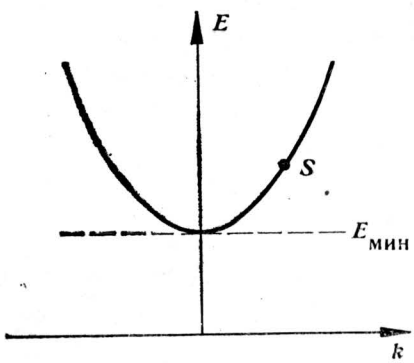
$$E = E_{\text{мин}} + A_x a^2 k_x^2 + A_y b^2 k_y^2 + A_z c^2 k_z^2 \qquad (12.2)$$

(вж. 11 гл., § 4).

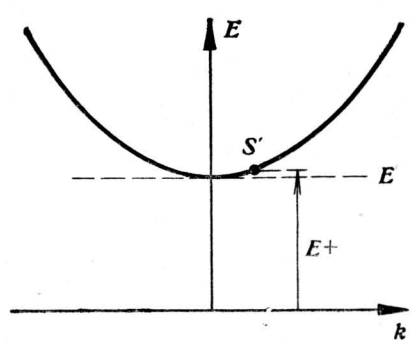
[1] Литература: Ч. Киттель, Введение в физику твердого тела, М.—Л., 1958, гл. 13, 14, 18.



Фиг. 12.1. Диаграма на енергията за електрон в кристала на изолатор



Фиг. 12.2. Енергията $E-$ е необходима за „раждане" на свободен електрон



Фиг. 12.3. Енергията $E+$ е необходима за „раждане" на дупка в състояние S'

Ако ние се интересуваме от движението на електрона в някаква определена посока, така че отношението между компонентите и големината на **k** през цялото време е едно и също, енергията е квадратична функция на вълновото число **n**, следователно на импулса на електрона. Можем да напишем

$$E = E_{мин} + \alpha k^2, \tag{12.3}$$

където α е някаква константа, и да начертаем графиката на зависимостта на E от k (фиг. 12.1). Такава графика ще наричаме „енергетическа диаграма". На такава графика електрон с определени енергия и импулс може да се представи с точка (точка S на фигурата).

Ние вече споменахме в гл. 11, че същото положение на нещата възниква, ако *отстраним* електрон от неутрален изолатор. Тогава на това място може да прескочи електрон от съседен атом. Той ще запълни „дупката", а сам ще остави на предишното си място нова „дупка". Такова поведение на електрона можем да опишем, като зададем амплитудата на вероятността за това *дупката* да се окаже около определен атом и като приемем, че *дупката* може да прескача от атом към атом. (При това е ясно, че амплитудата A за това дупката да прескочи от атома a към атома b е точно равна на амплитудата за това електронът да прескочи от атома b в дупката около атома a.) Математиката за *дупката* е същата, както за добавъчния електрон и ние можем да се убедим, че енергията на дупката е свързана с нейното вълново число чрез уравнение, което точно съвпада с (12.1) и (12.2), но, разбира се, с други числени стойности на амплитудите A_x, A_y и A_z. Дупката също има енергия, свързана с вълновото число на нейната амплитуда на вероятността. Енергията ѝ лежи в някаква ограничена зона и около дъното на зоната се изменя квадратично с нарастването на вълновото число (или на импулса) така, както на фиг. 12.1. Повтаряйки разсъжденията, проведени в гл. 11, §3, ние ще забележим, че *дупката също има поведение на класическа частица* с някаква определена ефективна маса с тази само разлика, че в некубическите кристали масата зависи от посоката на движението. И тъй дупката напомня за *частица с положителен заряд*, който може да се движи из кристала. Зарядът на частицата—дупка е положителен, понеже тя е съсредоточена в това място, където няма електрон; и когато тя се движи в някаква посока, всъщност това движение извършват електроните в обратна посока.

Ако в неутрален кристал бъдат поместени няколко електрона, тяхното движение ще напомня много на движението на атомите в газ, намиращ се под ниско налягане. Ако електроните не са твърде много, тяхното взаимодействие може да бъде пренебрегнато. Ако след това към кристала се приложи електрично поле, електроните ще започнат да се движат и ще потече електричен ток. По принцип те трябва да се отзоват на края на кристала и ако там има метален електрод да преминат в него, оставяйки кристала неутрален.

Точно така в кристала може да бъде въведен известен брой дупки. Те биха започнали да бродят навсякъде произволно. Ако се приложи електрично поле, те ще потекат към отрицателния електрод и когато го достигнат, биха могли да бъдат „снети" от него, което и произлиза, щом ги неутрализират електроните от металния електрод.

Електрони и дупки могат да се окажат в кристала едновременно. Ако броят им не е твърде голям, те също ще странствуват независимо. При наличие на електрично поле всички те ще дават своя принос в общия ток. По очевидни причини електроните се наричат *отрицателни носители*, а дупките—*положителни носители*.

Досега ние считахме, че електроните са внесени в кристала отвън или (за образуване на дупки) са отстранени от него. Но може също така „да се създаде" двойка електрон-дупка, като един свързан електрон се извади от неутрален атом и се намести

на известно разстояние от него в същия кристал. Тогава ние получаваме свободен електрон и свободна дупка и те ще се движат така, както беше описано вече.

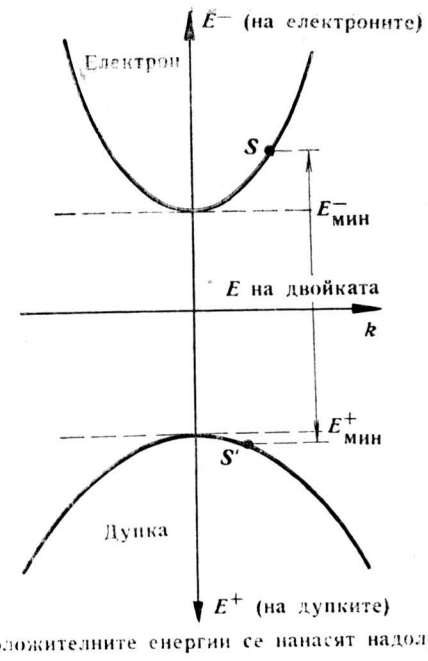
Енергията, която е необходима за поместване на електрона в състояние S (ние казваме: за „създаване“ на състоянието S), е енергията E^-, показана на фиг. 12.2. Това е някаква енергия, превишаваща $E^-_{\text{мин}}$. Енергията, необходима за „създаване“ на дупка в някакво състояние S', е енергията E^+ (фиг. 12.3), която стои малко по-високо от $E(=E^+_{\text{мин}})$. А за да се създаде двойка в състоянията S и S', ще бъде необходима енергия $E^- + E^+$.

Образуването на двойка е, както ще видим по-късно, твърде често срещан процес и много хора предпочитат да поместват фиг. 12.2 и фиг. 12.3 на един чертеж, при което енергията на *дупките* се отчита надолу, макар че тази енергия е *положителна*. На фиг. 12.4 ние сме обединили тези две графики. Предимството на такава графика се състои в това, че енергията $E_{\text{двойка}} = E^+ + E^-$, която е необходима за образуването на двойката (електрона в състояние S и дупката в състояние S'), се дава чисто и просто от разстоянието по вертикалата между S и S', както е показано на фиг. 12.4. Най-малката енергия, необходима за образуване на двойка, се нарича ширина на забранената зона или ширина на процепа и е равна на $E^-_{\text{мин}} + E^+_{\text{мин}}$.

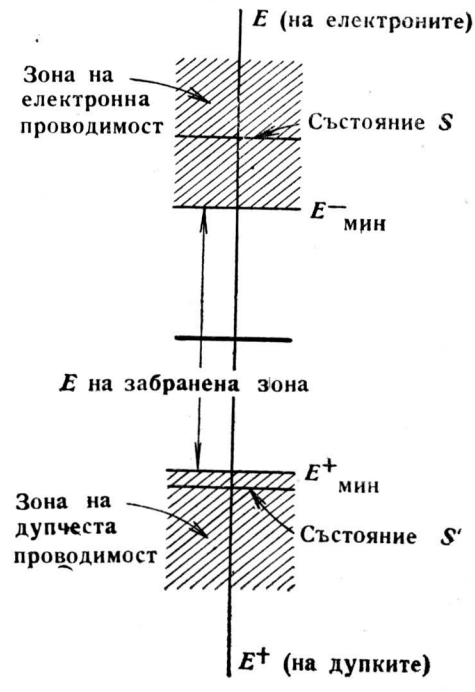
Понякога вие може да срещнете и по-проста диаграма. Рисуват я всички онези, които не се интересуват от променливата κ, и я наричат диаграма на енергетичните нивà. Тази диаграма (тя е показана на фиг. 12.5) просто показва допустимите енергии за електроните и дупките [1].

Как се създава двойка електрон-дупка? Има няколко начина. Например светлинни фотони (или рьонтгенови лъчи) може да се поглъщат и да образуват двойка; достатъчно е енергията на фотона да е по-голяма от ширината на забранената зона. Бързината на образуване на двойки е пропорционална на интензивността на светлината. Ако към краищата на кристала се притиснат два електрода и се приложи „отместващо“ напрежение, електроните и дупките ще започнат да се привличат от електродите. Токът във веригата ще бъде пропорционален на силата на светлината. Такъв е механизмът на явлението фотопроводимост и той влиза в действие при работа на фотоелементите.

Двойката електрон-дупка може да се образува също от частици с висока енергия. Когато бързо движеща се заредена частица (например протон или пион с енергия десетки и стотици MeV) преминава през кристал, нейното електрично поле може да изважда електрони от техните свързани състояния, образувайки двойка електрон-дупка. Подобни явления се срещат със стотици и хиляди на всеки милиметър от следата. След като частицата премине през кристала, носителите може да бъдат събрани и по този начин да се предизвика електрически импулс. Пред вас е механизмът на това, което се разиграва в полупроводниковите броячи които напоследък се използуват в опитите по ядрена физика. За такива броячи не са нужни полупроводници; те може да се изготвят и от кристални изолатори. Всъщност така и става; за първи път такъв брояч е бил направен от елмаз, който при стайна температура е изолатор. Нужни са обаче много чисти кристали, ако ние искаме електроните и дупките да достигат до електродите, без да бъдат захванати. По тази причина се използуват силиций и германий, тъй като от тях могат да бъдат получени образци с разумни размери (от порядъка на сантиметър) и голяма чистота.



Фиг. 12.4. Диаграма на енергията за електрон и дупка



Фиг. 12.5. Диаграма на енергетичните нива за електроните и дупките

[1] В много книжки същата тази диаграма се тълкува иначе. Скалата на енергията се отнася само до *електроните*. Вместо да се мисли за енергия на дупката, говори се за енергия, която *би имал* електронът, ако той запълни дупката. Тази енергия е по-малка от енергията на свободния електрон и по-точно с толкова, колкото е показано на фиг. 12.5. При такава интерпретация на скалата на енергията, ширината на забранената зона е най-малката енергия, с която трябва да се снабди *електронът*, за да може да премине от свързано състояние в зоната на проводимост.

Всичко досега се отнасяше само за свойствата на полупроводници и кристали при температури около абсолютната нула. При всяка ненулева температура има и друг механизъм за създаване на двойки електрон - дупка. Двойката може да бъде снабдена с енергия за сметка на топлинната енергия на кристала. Топлинните трептения на кристала могат да предадат на двойката своята енергия, като предизвикват „самопроизволно“ раждане на двойки.

Вероятността (за единица време) за това, че енергията, достигаща ширината на забранената зона $E_{\text{зона}}$, ще се съсредоточи в точката, където е разположен един от атомите, е пропорционална на $\exp(-E_{\text{зона}}/\varkappa T)$; тук T е температурата, а $\varkappa$ —константата на Болцман [вж. гл. 40 (том I)]. Близо до абсолютната нула тази вероятност е едва забележима, но с увеличаване на температурата вероятността за образуване на такива двойки нараства. Образуването на двойки при всяка крайна температура би трябвало да продължава безкрайно дълго, давайки през цялото време с постоянна скорост, все нови положителни и отрицателни носители. Разбира се, в действителност не може да бъде така, тъй като електроните много бързо отново случайно ще се присрещнат с дупки, електронът ще се „търкулне“ в дупката, а освободената енергия ще се поеме от решетката. Ние ще кажем, че елекронът и дупката са „анихилирали“. Има определена вероятност за това, че дадена дупка ще се срещне с електрон, при което те взаимно ще се унищожат.

Ако в единица обем има N_n електрона (n означава негативни или отрицателни носители), а плътността на положителните (позитивните) носители е N_p, вероятността за това, че за единица време електрон ще се срещне с дупка и те ще анихилират, е пропорционална на произведението $N_n\,N_p$. При равновесие тази скорост трябва да е равна на скоростта на образуване на двойките. Следователно при равновесие произведението $N_n\,N_p$ трябва да е равно на произведението на някаква константа и болцмановия множител.

$$N_p N_n = \text{const}\; e^{-\frac{E_{\text{зона}}}{\varkappa T}}. \qquad (12.4)$$

Говорейки за константа, ние имаме пред вид, че този множител е приблизително постоянен. По-пълната теория, която взема под внимание различните детайли на това, как електроните и дупките се „намират“ взаимно, показва, че „константата“ слабо зависи от температурата; главната зависимост от температурата обаче се съдържа в експонентата.

Да вземем например чисто вещество, което първоначално е било неутрално. При крайна температура може да се очаква, че броят на положителните и отрицателните носители ще бъде един и същ, т. е. $N_n = N_p$. Следователно всяко едно от тези числа трябва да се изменя с температурата по закона $e^{-E_{\text{зона}}/2\varkappa T}$. Изменението на много свойства на полупроводника (например на неговата проводимост) се определя главно от експоненциалния множител, тъй като останалите фактори зависят значително по-слабо от температурата. За германия ширината на забранената зона е равна например на 0,72 eV, а за силиция е около 1,1 eV.

При стайна температура $\varkappa T$ е около 1/40 eV. При такава температура вече има достатъчно дупки и електрони, които осигуряват забележима проводимост, докато да речем при 30°K (една десета от стайната температура) проводимостта е незабележима. Ширината на забранената зона за елмаза е 6—7 eV, за това при стайна температура той е добър изолатор.

12-2. Примесни полупроводници

Досега ние говорихме само за два начина за въвеждане на добавъчни електрони в кристалната решетка, която във всичко останало е съвършено идеална. Единият начин е да се впръска електрон от външен източник, а другият — да се отнеме свързан

електрон от неутрален атом, като се създава едновременно и електрон, и дупка. Електрони може обаче да се внедрят в проводящата зона на кристала и по съвсем друг начин. Да си представим германиев кристал, в който един от атомите на германия е заменен с атом на арсена. Атомът на германия има валентност, равна на 4, и кристалната структура се контролира от четирите валентни електрона. А валентността на арсена е равна на 5. Оказва се обаче, че отделен атом на арсена може да заеме място в решетката на германия (тъй като габаритите му са точно такива, каквито трябва), но при това той ще бъде принуден да действува като четиривалентен атом, употребявайки четири от валентните си електрони за създаване на връзки в кристала, отхвърляйки петия. Този излишен електрон е привързан много слабо към него— свързочната му енергия е по-малка от 1/10 eV. При стайна температура електронът лесно може да си набави такова малко количество енергия за сметка на топлинната енергия на кристала и да тръгне на свой риск без страх из решетката с права на свободен електрон. Примесен атом от рода на арсеновия се нарича *донорен възел*, понеже той може да снабди кристала с отрицателен носител. Ако германиевият кристал се изтегля от стопилка, в която е било добавено малко количество арсен, арсеновите донорни възли ще се разпределят из целия кристал и кристалът ще има определена плътност на внедрени отрицателни носители.

Би могло да се помисли, че едно незначително електрично поле, приложено към кристала, ще измете тези носители. Но това не може да се случи, тъй като всеки арсенов атом в решетката на кристала е положително зареден. За да остава кристалът неутрален като цяло, средната плътност на отрицателните носители — електроните — трябва да бъде равна на плътността на донорните възли. Ако вие приложите към двата края на този кристал два електрода и ги свържете с батерийки, ще протече ток; но ако през единия край изтичат електрони — носители, през другия край трябва да постъпват нови електрони на проводимост, така че средната плътност на електроните на проводимост в кристала остава винаги примерно равна на плътността на донорните възли.

Тъй като донорните възли са положително заредени, у тях се наблюдава стремеж да захванат някой от електроните на проводимост, когато последните блуждаят из кристала. Ето защо донорният възел действува именно като уловка, за която ние говорихме в предходния параграф. Но ако енергията на залавяне е достатъчно малка (както при арсена например), броят на заловените носители в даден момент ще представлява само една малка част от общия брой на носителите. За пълното разбиране на поведението на полупроводниците това залавяне на носители, разбира се, трябва да се вземе под внимание. По-нататък обаче ние ще смятаме, че енергията на залавяне е толкова ниска, а температурата така висока, че донорните възли нямат неутрализиращи електрони. Разбира се, това е само едно приближение.

В кристала на германия може също да се внедри примесен атом с валентност, равна на 3, например алуминиев атом. Този атом се стреми да се покаже като обект с валентност 4, присвоявайки си един добавъчен електрон от тези на своите съседи. Той може да открадне електрон от някой от съседните атоми на германия и да се окаже в края на краищата отрицателно зареден атом с ефективна валентност 4. Разбира се, когато той отмъкне електрон от германиевия атом, при последния остава дупка; и тази дупка започва да броди по кристала с права на положителен носител. Примесният атом, който е способен да образува дупка по този начин, се нарича *акцептор* (от корена „акцепт“ — приемам). Ако германиевият кристал или силициевият кристал се изтегля от стопилка, в която има алуминиева добавка, то в кристала ще има дупки с определена плътност, които действуват като положителни носители.

Когато към полупроводника е добавен донорен или акцепторен примес, ние говорим за „примесен“ полупроводник.

Когато германиев кристал с някакво количество внедрен донорен примес се намира при стайна температура, електроните на проводимост се доставят както от донорните възли, така и чрез раждане на електрон-дупчести двойки за сметка на топлинната енергия. Естествено, електроните от двата източника са напълно еквивалентни помежду си и в играта на статистическите процеси, водещи до равновесие, участвува техният пълен брой N_n. Ако температурата не е твърде ниска, броят на отрицателните носители, доставени от атомите на донорния примес, е равен примерно на броя на примесните атоми. При равновесие уравнението (12.4) все още трябва да е в сила; произведението N_nN_p при дадена температура е напълно определено число. Това означава, че добавянето на донорен примес, което увеличава числото N_n, предизвиква същото намаление на броя на положителните носители N_p, така че N_nN_p остава неизменно. Ако примесната концентрация е достатъчно висока, броят на отрицателните носители N_n се определя от количеството на донорните възли и почти не зависи от температурата — всички изменения в експонентата стават за сметка на броя N_p, дори ако той е много по-малък от N_n. В кристал с невисока концентрация на донорен примес, който във всяко друго отношение е чист, преобладават отрицателни носители; такъв материал се нарича полупроводник от „n-тип“.

Ако в кристалната решетка е добавен примес от акцепторен тип, някои от новите дупки, блуждаейки из кристала, ще започнат да анихилират с някои от свободните електрони, създадени от топлинните флуктоации. Това ще продължава дотогава, докато не се постигне удовлетворяване на равенството (12.4). При условия на равновесие количеството положителни носители нараства, а количеството отрицателни намалява, поради което тяхното произведение се поддържа едно и също. Материал, който има в повече положителни носители, се нарича полупроводник от „p-тип“.

Ако към полупроводников кристал притиснем два електрода, които свързваме с източник на потенциална разлика, във вътрешността на кристала ще се появи електрично поле. То заставя положителните и отрицателните носители да се движат и започва да тече електрически ток. Да видим най-напред какво става в материал от n-тип, в който носителите на заряди са предимно отрицателни. В такъв материал дупките може да се пренебрегнат; те оказват слабо влияние върху тока, тъй като са много малко. В идеален кристал при крайна температура (а особено в кристал с примеси) електроните се преместват не съвсем безпрепятствено Те непрекъснато изпитват удари, които ги отклоняват от началния им път, т.е. изменят техния импулс. Тези стълкновения фактически са същите онези разсейвания, за които ние говорихме в предходната глава и които се причиняват от „грапавините“ в кристалната решетка. В материал от n -тип главна причина за разсейването са същите донорни възли, които доставят носители. Щом енергията на електроните на проводимостта е малко по-друга в донорните възли, вероятностните вълни непременно ще се разсейват на това място. Но дори в идеално чист кристал се срещат (при температура, различна от нула) нерегулярности в решетката, предизвикани от топлинните трептения. От гледна точка на класическата физика може да се каже, че атомите не са разположени точно в правилна решетка, а всеки момент са малко отместени от съответните възли на решетката благодарение на топлинните трептения. Енергията, която се свързва с всяка точка на решетката, според теорията, изложена в гл. 11, макар и малко, се мени от едно място към друго, така че вълните на вероятностните амплитуди не се предават идеално, а се разсейват по някакъв неправилен начин. И при много високи температури или за изключително чисти вещества това разсейване може да стане твърде важно, но в повечето примесни полупроводници, използувани в практическите устройства, разсейване може да има само за сметка на примесните атоми. Ние сега ще оценим големината на електричната проводимост за такива вещества.

Ако към полупроводник от n-тип приложим електрично поле, всеки отрицателен носител придобива в това поле ускорение, увеличавайки скоростта си дотогава, докато не се разсее от някой донорен възел. Това означава, че носителите, които обикновено се движат в случайни посоки благодарение на своята топлинна енергия, ще започнат да повишават своята средна скорост на дрейф по протежение на силовите линии на електричното поле, създавайки известен ток в кристала. Скоростта на дрейфа като правило е много малка в сравнение с типичните топлинни скорости, така че може да се приеме, оценявайки силата на тока, че средното време на странствуване на носителя от удар до удар е постоянно. Да допуснем, че ефективният заряд на отрицателния носител е равен на q_n. Силата, действуваща на носителя в електричното поле $\mathscr{E}$, ще бъде равна на $q_n\,\mathscr{E}$. В гл.43, §3 (том 1) ние пресмятахме именно средната скорост на дрейфа при такива условия и намерихме, че тя е равна на $F\tau/m$, където F е силата, действуваща на заряда; τ—средното време на свободния пробег между два удара, а m —масата. Вместо последната трябва да се постави ефективната маса, която ние пресмятахме в предходната глава, но тъй като ние се интересуваме само от приблизителна оценка, ще предположим, че тази ефективна маса е една и съща във всички посоки. Да я означим с m_n. В това приближение средната скорост на дрейфа ще бъде равна на

$$\mathbf{v}_{\text{дрейф}} = \frac{q_n \mathscr{E} \tau_n}{m_n}. \tag{12.5}$$

Като се знае скоростта на дрейфа, може да се намери токът. Плътността на електрическия ток $\mathbf{j}$ е равна просто на броя на носителите в единица обем N_n, умножен на средната скорост на дрейфа и на заряда на носителите. Ето защо плътността на тока е равна на

$$\mathbf{j} = N_n \mathbf{v}_{\text{дрейф}}\, q_n = \frac{N_n q_n^2 \tau_n}{m_n} \mathscr{E}. \tag{12.6}$$

Ние виждаме, че плътността на тока е пропорционална на електричното поле; такива полупроводникови материали се подчиняват на закона на Ом. Коефициентът на пропорционалност между $\mathbf{j}$ и $\mathscr{E}$ или проводимостта σ е равна на

$$\sigma = \frac{N_n q_n^2 \tau_n}{m_n}. \tag{12.7}$$

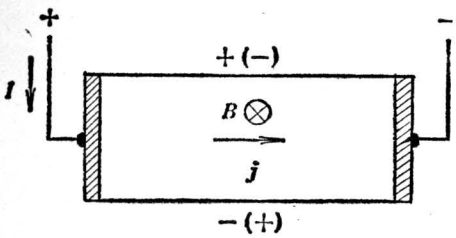
За материали от n-тип проводимостта като цяло не зависи от температурата. Първо, общият брой на основните носители N_n се определя главно от плътността на донорите в кристала (докато температурата не е толкова ниска, че да позволява на атомите да залавят твърде много носители) и второ, средното време на пробег от удар до удар τ_n се регулира главно от плътността на примесните атоми, а ясно е, че тя не зависи от температурата.

Същите разсъждения могат да се направят и за вещества от p-тип, като се изменят по съответен начин значенията на параметрите, които се появяват в (12.7). Ако в даден момент броят на отрицателните и положителните носители е сравним, приносът на носителите от двата рода трябва да се събере. Пълната проводимост ще се определя от формулата

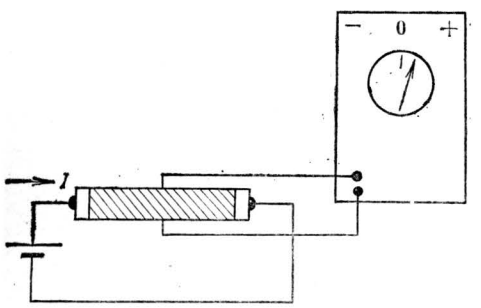
$$\sigma = \frac{N_n q_n^2 \tau_n}{m_n} + \frac{N_p q_p^2 \tau_p}{m_p}. \tag{12.8}$$

За много чисти вещества N_n и N_p са приблизително равни. Те са по-малки, отколкото за материали с примеси, така че и проводимостта ще бъде по-малка. Освен това те рязко се изменят с температурата (по закона $e^{-E_{\text{зона}}/\varkappa T}$), поради което проводимостта може да се изменя извънредно бързо с изменение на температурата.

12-3. Ефект на Хол



Фиг. 12.6. Ефектът на Хол възниква при действие на магнитни сили върху носителите.
Отгоре и отдолу са посочени знаците на заряда при положителни и отрицателни (в скобите) носители



Фиг. 12.7. Измерване на ефекта на Хол

Разбира се, твърде странно е, че във веществото, където единствен повече или по-малко свободен обект е електронът електрическият ток се предизвиква от дупки, които имат поведение на положително заредени частици. Ето защо ние искаме да опишем опит, който достатъчно ясно свидетелствува, че знакът на носителя на електрически ток може да бъде положителен. Нека имаме парче с подходяща форма, приготвено от полупроводниково вещество (или от метал), и да приложим към него електрично поле с цел да предизвикаме ток в определено направление, например в хоризонтално (фиг. 12.6). Нека наред с това към парчето приложим магнитно поле под прав ъгъл спрямо тока, да речем такова, което има посока, *перпендикулярна към равнината* на чертежа. Движещите се носители ще изпитват действието на магнитната сила q ($\mathbf{v}\times\mathbf{B}$). А тъй като средната скорост на дрейфа е насочена или наляво, или надясно (в зависимост от това, какъв знак има зарядът на носителя), действуващата на носителите средна магнитна сила ще бъде насочена или нагоре, или надолу. Впрочем не! При избраните от нас посоки на тока и магнитното поле, магнитната сила, действуваща на зарядите, винаги ще бъде насочена нагоре. Положителните заряди, движещи се по посока на вектора **j** (надясно), са подложени на действието на сила, насочена нагоре. А ако токът се пренася от отрицателни заряди, те ще се движат наляво (при същия знак на тока на проводимостта) и също ще изпитват действието на сила, насочена нагоре. Но след установяването на стационарен ток никакво движение на носителите нагоре не може да има, понеже ток може да тече само от ляво на дясно. Отначало някои заряди могат да се насочат нагоре, създавайки по горния край на полупроводника повърхнинна плътност на заряда и оставяйки равна по големина и обратна по знак повърхнинна плътност на заряда на долната граница на кристала. Заряди на долната и горната повърхност ще се натрупват дотогава, докато електричните сили, с които те действуват на движещите се заряди, не уравновесят (осреднено) действието на магнитната сила, след което равновесният ток потича по хоризонталата. Зарядите на горната и долната граница създават потенциална разлика по вертикалата напречно на кристала, която може да се измери с помощта на високоомен волтметър (фиг. 12.7). Знакът на потенциалната разлика, който волтметърът отбелязва, ще зависи от знака на зарядовите носители, които са причина за тока.

Когато тези опити са били замислени, смятало се е, че знакът на потенциалната разлика ще бъде отрицателен, както и следва да бъде при условие, че носителите са отрицателни. Ето защо всички са били удивени, когато се оказало, че при някои вещества знакът на потенциалната разлика съвсем не е този. Работата изглеждала така, сякаш носителят на тока е частица с положителен заряд. От нашите разсъждения за примесните полупроводници е ясно, че полупроводник от n-тип следва да предизвика знак на потенциалната разлика, съответствуващ на отрицателни носители, а полупроводник от p-тип трябва да предизвиква потенциална разлика с противоположен знак, тъй като токът се създава от положително заредени дупки.

Откриването на аномален знак на потенциалната разлика в ефекта на Хол най-напред е било направено не в полупроводник, а в метал. Смятало се е, че в металите поне с проводимост винаги се занимават електроните, а внезапно се оказало, че за берилия знакът на потенциалната разлика не е този. Сега е ясно, че в металите, както и в полупроводниците, при някои обстоятелства „обектите“, които са отговорни за проводимостта, са дупки. Макар че в крайна сметка в кристала се движат електрони, съотношението между импулс и енергия и отклик на външно поле са точно такива, каквито би трябвало да се очаква, ако електрическият ток би протичал за сметка на движението на положителни частици.

Да видим не може ли качествено да се оцени каква потенциална разлика може да се получи при ефекта на Хол. Ако токът през волтметъра (вж. фиг. 12.7) е пренебрежимо малък, зарядите във вътрешността на полупроводника се движат от ляво на дясно и вертикалната магнитна сила трябва точно да се уравновесява от вертикалното електрично поле, което ще означим с $\mathscr{E}_\perp$ (индексът означава „напречно“). За да може това електрично поле да уравновесява магнитните сили, трябва да е изпълнено равенството

$$\mathscr{E}_\perp = -\mathbf{v}_{\text{дрейф}} \times \mathbf{B}. \tag{12.9}$$

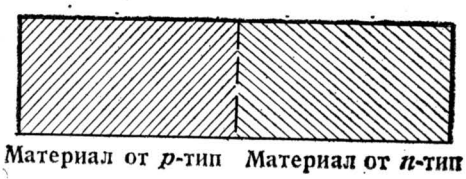
Спомняйки си връзката между скоростта на дрейфа и плътността на електрическия ток, която се дава от (12.6), получаваме

$$\mathscr{E}_\perp = -\frac{1}{qN}\,\mathbf{j} \times \mathbf{B}.$$

Потенциалната разлика между горния и долния край на кристала е равна естествено на интензитета $\mathscr{E}_\perp$ на електричното поле, умножен с височината на кристала. Интензитетът на електричното поле в кристала $\mathscr{E}_\perp$ е пропорционален на плътността на тока и на интензитета на магнитното поле. Множителят на пропорционалност $\frac{1}{qN}$ се нарича коефициент на Хол и обикновено се означава с R_H. Коефициентът на Хол зависи просто от плътността на носителите при условие, че носителите от даден тип (с даден знак) са значително повече. Ето защо измерването на ефекта на Хол дава удобен начин за определяне по опитен път на плътността на носителите в полупроводниците.

12-4. *p*—*n*-преходи между полупроводниците

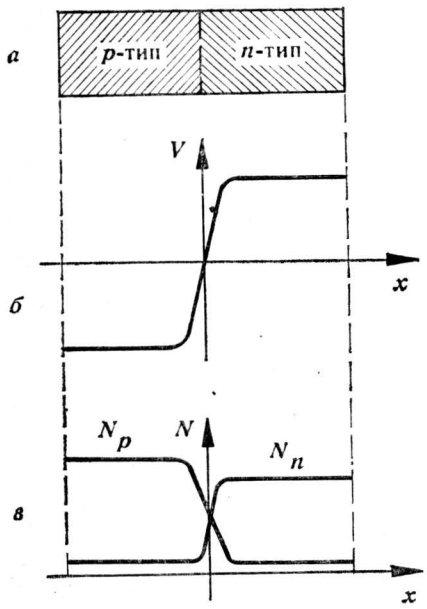
Сега ние искаме да изясним какво се получава, ако се вземат две парченца германий или силиций с нееднакви вътрешни характеристики, да речем с нееднакво количество примеси, и да ги допрем едно до друго, за да възникне „преход“. Да започнем с това, което се нарича *p*-*n*-преход, когато от едната страна на границата стои германий от *p*-тип, а от другата — германий от *n*-тип (фиг. 12.8). Не е лесно практическото осъществяване на допирането на двете парченца германий така, че да се получи хомогенен контакт на атомно ниво между тях. Вместо това преходите се правят от един кристал, обработен не по един и същ начин в двата края. Един от начините се състои в това, че след като е изтеглена половината на кристала от стопилката, към останалата част на тази стопилка се добавя подходящ примес. Друг от начините се състои в това на повърхността на кристала да се нанесе малко примесен елемент и след това кристалът да се загрее така, че част от примесните атоми да дифундират в тялото на кристала. Изготвените по тези начини *p*-*n*-преходи нямат рязка граница, макар че самите граници може да бъдат направени много тънки — до 10^{-4} cm. В нашите разсъждения ние ще си представяме идеалния случай, когато тези две области на кристала с различни свойства са рязко разграничени.



Фиг. 12.8. *p*—*n*-преход

В *n*-областта на *p*-*n*-прехода има свободни електрони, които могат да преминават от едно място на друго, а също така фиксирани донорни възли, които уравновесяват пълния електричен заряд. В *p*-областта има свободни дупки, също преминаващи от едно място на друго, и равно количество отрицателни акцепторни възли, неутрализиращи пълния заряд на дупките. Но в действителност такова положение на нещата е възможно само дотогава, докато между двата материала не съществува контакт. Веднага щом материалите се съединят, положението по границата се изменя. Сега, достигайки границата на материала от *n*-тип, електроните няма да се отразят обратно, както това би било при свободна повърхност, а могат направо да преминат в материала от *p*-тип. Ето защо част от електроните на материала от *n*-тип

ще се стремят да преминат в материала от p-тип, където електроните са по-малко. Но така не може да продължава безкрайно, защото с намаляване на електроните в n-областта, нейният заряд (положителен) става все по-голям, докато не възникне електрично напрежение, което прекратява дифузията на електроните в p-областта. По подобен начин положителните носители от материала от p-тип получават възможност да преминават през p-n-прехода в материала от n-тип, оставяйки след себе си непогасени отрицателни заряди. При равновесни условия пълният дифузионен ток трябва да бъде равен на нула. Това става благодарение на възникналите електрични полета, които действуват така, че да връщат положителните носители обратно в p-областта.



Фиг. 12.9. Електричен потенциал и плътност на носителите в полупроводников p—n-преход без отместващо напрежение

Описаните от нас два дифузионни процеса стават едновременно; и двата, както се вижда, действуват в такава посока, че материалът от n-тип се зарежда положително, а материалът от p-тип — отрицателно. Вследствие на крайната проводимост на полупроводникови материали изменянето на потенциала между p-областта и n-областта произлиза в сравнително тесен участък около границата; в основната част на всеки материал потенциалът ще бъде хомогенен. Прекарваме перпендикулярно на границата ос x. Тогава електричният потенциал ще се мени с x така, както е показано на фиг. 12.9, *б*. На фиг. 12.9, *в* е показано очакваното изменение на плътността N_n на n-носителите и на плътността N_p на p-носителите. Далеч от p-n-прехода плътностите N_n и N_p на носителите трябва да бъдат просто равни на онази равновесна плътност, която следва да възникне в определено парче от същия материал при същата температура (фиг. 12.9. представя случай на преход, при който в материала от p-тип примесът е повече, отколкото в материала от n-тип). Поради потенциалния пад на границата на p-n-прехода налага се положителните носители да се изкачват на потенциалния хълм, за да попаднат в p-областта. Това означава, че при условия на равновесие в материала от n-тип ще има по-малко положителни носители, отколкото в материала от p-тип. Може да се очаква (спомнете си законите на статистическата механика), че отношението на количествата носители от p-тип в двете области ще се дава с уравнението

$$\frac{N_p \ (p\text{-област})}{N_p \ (n\text{-област})} = e^{-q_p V/\varkappa T}. \qquad (12.10)$$

Произведението $q_p V$ в числителя на експоненциалния показател е точно онази енергия, която е нужна, за да се пренесе зарядът q_p през потенциалната разлика V.

Точно такова уравнение е изпълнено и за плътностите на носителите от n-тип

$$\frac{N_n \ (n\text{-област})}{N_n \ (p\text{-област})} = e^{-q_n V/\varkappa T}. \qquad (12.11)$$

Ако ние знаем равновесните плътности във всеки един от двата материала, кое да е от тези уравнения може да ни даде потенциалната разлика на границата на p-n-прехода.

Забележете, че за да се получават едни и същи стойности за потенциалите V от (12. 10) и (12. 11), произведението $N_p N_n$ трябва да бъде едно и също в p-областта, и n-областта (както си спомняте $q_n = -q_p$). Но ние още по-рано видяхме, че това произведение зависи само от температурата и от ширината на забранената зона на кристала. Ако двете части на кристала са поставени при еднаква температура, двете уравнения ще са съвместни и ще дават една и съща стойност за потенциалната разлика.

Но щом между двете страни на p-n-прехода има разлика между потенциалите, това напомня за батерийка. Ако се свърже n-областта с p-областта с помощна жичка, може би по нея ще започне да тече ток? Това би било забележително, токът би текъл постоянно, без да изтощава материала, и ние бихме имали вечен източник на енергия въпреки втория закон на термодинамиката! Но ако вие наистина свържете p-областта и n-областта с

проводници, никакъв ток не ще протече. И лесно е да се разбере защо.

Да вземем най-напред проводник от материал без примеси. Ако го свържем с *n*-областта, получава се преход, благодарение на който възниква потенциална разлика. Нека тя да бъде равна например на половината от цялата потенциална разлика между *p*- и *n*-областите. А когато ние допрем нашата чиста жичка до *p*-областта на *p*-*n*-прехода, там отново, благодарение на новия преход, възниква потенциална разлика, пак равна на половината от потенциалния пад на *p*-*n*-прехода. При всички преходи потенциалните разлики се нагласят една към друга така, че в схемата никакъв ток няма да протече. И с каквато и жичка да свързвате двете страни на *p*-*n*-прехода във вашата схема, винаги възникват два нови прехода и дотогава, докато температурата на всички преходи е еднаква, потенциалните скокове, възникнали на преходите, ще се компенсират и ток няма да има. Оказва се обаче (ако вие вземете под внимание всички детайли), че ако при една част от преходите температурата се различава от температурата на останалите преходи, ток ще има. Този ток ще нагрява едни преходи, като охлажда други, и топлинната енергия ще се превръща в електрическа. Това явление определя действието на термодвойките, които се използуват за измерване на температурни разлики и на термоелектричните генератори. Същото явление се използува и при работата на неголеми хладилници.

Но ако нямаме начин да измерим потенциалната разлика между двете страни на един *p*-*n*-преход, тогава откъде се взема нашата увереност в това, че потенциалният пад, показан на фиг. 12.9, наистина съществува? Преди всичко можем да осветим прехода със светлина. Когато светлинните фотони се поглъщат, те могат да образуват двойка електрон—дупка. В това силно електрично поле, което съществува в прехода (и което е равно на наклона на потенциалната крива на фиг. 12.9), дупката ще се насочи към *p*-областта, а електронът — към *n*-областта. Ако сега двете страни на прехода се включат към външна верига, тези добавъчни заряди ще предизвикат ток. Светлинната енергия преминава в електрическа енергия на прехода. Слънчевите батерии, които генерират електрическа енергия в спътниците, действуват именно на този принцип.

Обсъждайки свойствата на полупроводниковия преход, ние предполагахме, че дупките и електроните действуват повече или по-малко независимо, ако не се смята това, че те все пак някак идват в състояние на топлинно равновесие. Когато ние говорихме за тока, който се получава при осветяване на прехода със светлина, предполагахме, че електронът или дупката, образуващи се в областта на прехода, успяват да попаднат в тялото на самия кристал, преди да анихилират с носител с противоположна полярност. Анихилацията на двойки електрон — дупка (наричана често „рекомбинация“) в непосредствена близост до прехода, където плътността на носителите от двата знака е примерно еднаква, е много важен ефект и той трябва да се взема под внимание при детайлен анализ на полупроводниковия преход.

Ние предполагахме, че дупката или електронът, образували се в областта на прехода, имат голям шанс да попаднат в основното тяло на кристала още преди да са рекомбинирали. Типичното време, необходимо на електрона или на дупката за намиране на противоположен партньор и анихилиране, за типичните полупроводникови материали се движи между 10^{-3} и 10^{-7} s. Това време впрочем е много по-голямо от времето на средния свободен пробег τ между ударите с разсейващите възли в кристала — времето, което ние използувахме при анализа на проводимостта. В типичния *p*-*n*-преход времето, необходимо за изтласкване в тялото на кристала на електрона или дупката, възникнали в областта на прехода, е много по-малко от времето на рекомбинация. Затова повечето възникнали двойки се вливат във външния ток.

12-5. Изправяне на променлив ток от *p-n*-прехода между два полупроводника

Сега ние ще покажем защо *p-n*-преходът действува като токоизправител. Ако към него приложим напрежение с един знак, ще протече силен ток, ако напрежението е с друг знак, ток почти няма да тече. А ако към *p-n*-прехода се приложи променливо напрежение, тогава ток ще тече само в една посока — токът се „изправя". Да видим още един път, какво ще се получи при условия на равновесие, описани от кривите на фиг. 12.9. В материала от *p*-тип има висока концентрация N_p на положителни носители. Тези носители дифундират навсякъде и известно количество от тях всяка секунда се приближава до прехода. Този ток на положителните носители, достигащи *p-n*-прехода, е пропорционален на N_p. По-голямата част от тях обаче се връща назад, без да е в състояние да преодолее високия потенциал на бариера при *p-n*-прехода и само частта $e^{-qV/\varkappa T}$ от тях преминава по-нататък. Има също ток на положителните носители, приближаващи се към прехода от другата страна. Този ток също е пропорционален на плътността на положителните носители в *n*-областта, но тук плътността на носителите е много по-ниска от плътността в *p*-областта. Когато положителните носители от *n*-областта се приближават към прехода, по пътя си те срещат потенциал с отрицателен наклон и веднага се свличат по него „надолу" на *p*-страната на прехода. Да означим този ток с I_0. В условия на равновесие токовете в двете посоки са еднакви. Следователно може да се очаква, че ще е изпълнено следното съотношение

$$I_0 \sim N_p\,(n\text{-област}) = N_p\,(p\text{-област})\,e^{-qV/\varkappa T}. \qquad (12.12)$$

Вие виждате, че всъщност то съвпада с (12.10). Ние просто го изведохме по друг начин.

Да допуснем обаче, че сме понижили напрежението на *n*-страната на *p-n*-прехода с ΔV; това може да стане, като се приложи към *p-n*-прехода външна потенциална разлика. Сега разликата между потенциалите от двете страни на потенциалната бариера вече не е V, а $V-\Delta V$. В израза за тока на положителните носители от *p*-областта в *n*-областта сега в показателя на експонентата ще стои именно тази потенциална разлика. Означавайки този ток с I_1, имаме $I_1 \sim N_p\,(p\text{-област})\,e^{-q(V-\Delta V)/\varkappa T}$.
Той е по-голям $e^{-q\Delta V/\varkappa T}$ пъти от тока I_0. Значи между I_1 и I_0 съществува следната връзка

$$I_1 = I_0\ e^{+q\Delta V/\varkappa T}. \qquad (12.13)$$

Токът в *p*-областта при наличието на външно напрежение ΔV расте експоненциално. А токът на положителните носители в *n*-областта остава постоянен, при условие че ΔV не е твърде голямо. Достигайки бариерата, тези носители както преди ще срещнат пред себе си потенциален склон и ще се „свличат" по него надолу в *p*-областта. (Ако ΔV е по-голямо от естествената потенциална разлика V, положението може да се измени, но ние няма да разглеждаме какво става при такива високи напрежения.) В крайна сметка токът на положителните носители I, протичащ през *p-n*-прехода, се определя от разликата на токовете в двете посоки:

$$I = I_0\,(e^{+q\Delta V/\varkappa T} - 1). \qquad (12.14)$$

Дупчестият ток I тече в *n*-областта. Там дупките дифундират в самата *n*-област и въобще могат да анихилират при среща с основната маса отрицателни носители — електроните. Загубата на електрони, взели участие в тази анихилация, се набавя от външния контакт при материала от *n*-тип.

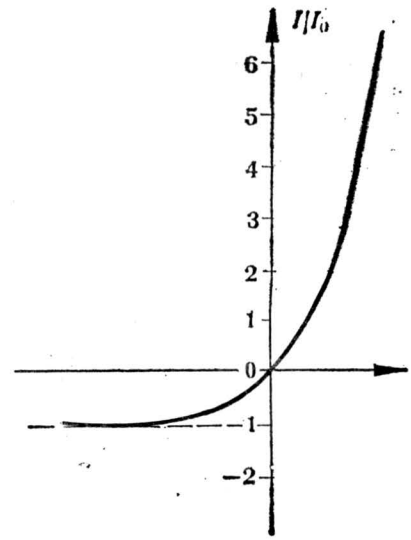
Когато $\Delta V = 0$, и токът в (12.14) е равен на нула. Ако ΔV е положителна величина, токът рязко расте с нарастване на напрежението, а ако ΔV е отрицателно, знакът на тока се изменя, но експоненциалният член бързо става пренебрежимо малък и отрицателният ток никога не превишава I_0 — величина, която според нашето предположение е много малка. Този обратен ток I_0 е

ограничен от малката плътност, която имат носителите в n-областта.

Ако вие проведете точно същия анализ за тока на отрицателните носители, протичащ през p-n-прехода най-напред без външна потенциална разлика, а след това с малка, приложена отвън потенциална разлика ΔV, то за сумарния електронен ток вие отново ще получите уравнение, подобно на (12.14). Тъй като пълният ток се дава от сумата на токовете на носителите от двата рода, формулата (12.14) е приложима и към пълния ток; при това само трябва токът I_0 да се отъждестви с максималния ток, който може да тече при промяна на знака на напрежението.

Волтамперната характеристика (12.14) е показана на фиг. 12.10. Тя ни демонстрира типичното поведение на кристалните диоди, подобни на тези, които се използуват в съвременните електронни сметачни машини. Необходимо е обаче да се отбележи, че (12.14) е справедливо само при не много високи напрежения. При напрежения, сравними с естествена вътрешна потенциална разлика V (или превишаващи я), в игра влизат нови явления и токът вече не се подчинява на толкова просто уравнение.

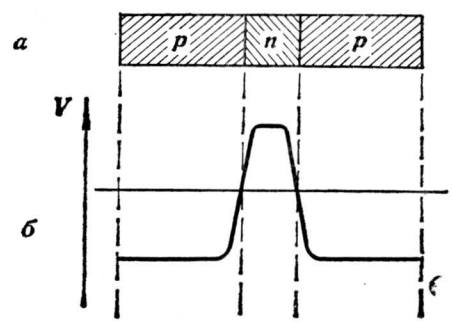
Може би вие ще си спомните, че ние получихме точно такова уравнение, когато говорихме за „механичния изправител" — спирачен механизъм с куценце [вж. гл.46 (том I)]. Ние получихме същите уравнения, защото лежащите в тяхната основа физически процеси са твърде сходни.



Фиг. 12.10. Зависимост на тока през $p-n$-прехода от приложеното към него напрежение

12-6. Транзистор

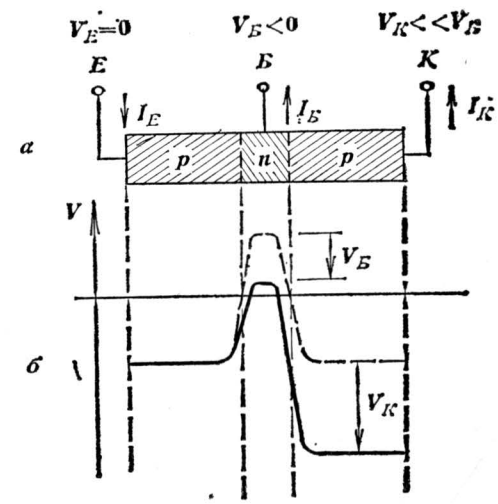
Може би най-важното приложение на полупроводниците се състои в изобретяването на транзистора. Той се състои от два полупроводникови p-n-прехода, плътно допрени един до друг, и неговата работа частично се опира на тези принципи, които ние току-що описахме, разказвайки за полупроводниковия диод — изправящия p-n-преход. Да предположим, че ние сме изготвили малко полупроводниково паралелепипедче, съставено от три слоя: p-област, n-област и отново p-област (фиг. 12.11, *а*). Такова съчетание се нарича p-n-p-транзистор. p-n-преходите в транзистора имат примерно същото поведение, както на описваните в преходния параграф p-n-преходи. В частност при всеки p-n-преход трябва да се наблюдава потенциален пад — намаляване на потенциала от n-областта към всяка p-област. Ако вътрешните свойства на двете p-области са еднакви, потенциалът ще се мени по дължината на паралелепипедчето така, както е показано на фиг. 12.11, *б*.



Фиг. 12.11. Разпределение на потенциала по дължината на транзистора, когато не е приложено външно напрежение

Сега представете си, че всяка от трите области е свързана с източник на външно напрежение (фиг. 12.12, *а*). Ние ще измерваме всички напрежения относно напрежението на контакта, свързан с лявата p-област, така че потенциалът на този контакт можем да считаме равен на нула. Този контакт ще наричаме *емитер*; n-областта се нарича *база* или *основа* и на нея се подава слаб отрицателен потенциал; дясната p-област се нарича *колектор* и се намира под много голям отрицателен потенциал. При тези условия потенциалът ще се мени по дължината на кристала така, както е показано на фиг. 12.12, *б*.

Да видим най-напред какво става с положителните носители, защото тяхното поведение преди всичко управлява работата на p-n-p-транзистора. Щом като потенциалът на емитера е по-висок от потенциала на базата, от емитера към базата ще протича ток на положителни носители. Този ток е доста голям, тъй като пред нас е преход, работещ при „подтикващо напрежение" (което отговаря на дясната половина на кривата на фиг. 12.10). При такива условия положителните носители или дупките ще се „емитират" от p-областта към n-областта. Може да се помисли, че този ток ще протече през контакта *Б* от n-областта. Но точно тук е скрит секретът на транзистора. Тази n-област се прави много тясна, с дебелина 10^{-3} см и даже по-тясна, много по-тясна от нейните напречни размери. Следователно много е голям шансът дупките, попаднали в n-областта, да успеят да преминат чрез ди-



Фиг. 12.12. Разпределение на потенциала в работещ транзистор

фузия през цялата област до следващия p-n-преход, преди да анихилират с електроните от n-областта. А когато те дойдат до дясната граница на n-областта, те се оказват пред стръмен потенциален склон и веднага се „свличат“ по него в дясната p-област. Тази страна на кристала се нарича *колектор*, тъй като там се събират дупките, след като те преминат през n-областта. В един типичен транзистор почти целият дупчест ток, създаден в емитера, протича през базата и неговите носители се събират от колектора. Само нищожно количество (части от процента) от тези носители се включват в тока, който протича през електрода на базата. Сумата на токовете, протичащи през базата и колектора естествено е равна на тока, протичащ през емитера.

Сега да се опитаме да си представим какво ще се получи, ако изменяме леко потенциала $V_Б$ на контакта *Б*. Тъй като ние се намираме на сравнително стръмна част на кривата, представена на фиг. 12.10, леки изменения на потенциала $V_Б$ ще се отразяват доста значително върху стойността на тока I_E на емитера. А отрицателното напрежение на колектора V_K е много по-голямо от отрицателното напрежение на електрода на базата и тези слаби изменения на потенциала на базата няма да се отразят съществено върху стръмнината на потенциалния пад между базата и колектора. Повечето положителни носители, преминали в n-областта, както преди ще попадат оттам в колектора. И тъй на измененията на потенциала на базата ще отговарят изменения на тока I_K, протичащ през колектора. Същественото обаче е това, че токът през базата $I_Б$ през цялото време съставлява само една малка част от тока през колектора. Транзисторът е усилвател; слабият ток $I_Б$, протичащ през електрода на базата, води до силен ток (100 пъти по-силен, дори повече) през колекторния електрод.

А как стои работата с електроните — с отрицателните носители, които ние досега пренебрегвахме? Забележете най-напред, че между базата и колектора ние не можем да очакваме какъвто и да било забележим електронен ток. При толкова голямо отрицателно напрежение на колектора електроните от базата би трябвало да преодолеят много висока потенциална бариера и вероятността за това е много малка. Електронният ток през колектора е много слаб.

Но, от друга страна, електроните от базата *могат* да преминават в областта на емитера. Може да се очаква, че електронният ток в тази посока ще бъде сравним с дупчестия ток от емитера към базата. Такъв електронен ток не носи полза, дори обратното, защото той увеличава пълния ток през базата, нужен за протичането на дупчест ток с дадената сила през колектора. Ето защо транзисторът се изготвя така, че електронният ток към емитера да се сведе до минимално възможния. Електронният ток е пропорционален на N_n (база) — плътноста на отрицателните носители в областта на базата — докато дупчестия ток от емитера зависи от N_p (емитер) — плътноста на положителните носители в областта на емитера. Чрез добавяне на сравнително малко количество примес в материала от n-тип величината N_n (база) може да бъде направена по-малка от N_p (емитер). (Освен това силно помага твърде малката дебелина на базата, тъй като изминането на дупките от тази област към колектора забележимо увеличава средния дупчест ток от емитера към базата, без да се засяга при това електронният ток.) В крайна сметка токът на електроните през p-n-прехода емитер-база може да бъде направен много по-слаб от тока на дупките, така че електроните не играят забележима роля в работата на p-n-p-транзистора. Токовете се определят главно от движението на дупките и транзисторът играе роля на усилвател.

Транзистор може да се направи също, като се сменят местата на материалите от p-тип и n-тип на фиг. 12.11. Тогава се получава т. нар. n-p-n-транзистор. В такъв транзистор основният ток е електронен и той тече от емитера към базата, а оттам в колектора. Разбира се, всички разсъждения, които ние направихме за p-n-p-транзистора, са валидни еднакво и за n-p-n-транзистора, при условие че се изменят знаците на потенциалите на електродите.

13

Приближение на независимите частици

13-1. Спинови вълни

13-1. Спинови вълни

13-2. Две спинови вълни

13-3. Независими частици

13-4. Молекула на бензола

13-5. Още малко органична химия

13-6. Други приложения на приближението

В гл. 11 ние развихме теория за разпространението на електрона или каква да е друга „частица", например едно състояние на атомно възбуждане, в кристална решетка. В предходната глава ние приложихме тази теория към полупроводниците. И независимо от това, че там се срещат много електрони, ние винаги пренебрегвахме каквито и да било взаимодействия между тях. Това, разбира се, не е нищо друго освен едно приближение и ние сега ще се постараем да вникнем по-дълбоко в самата мисъл за това, че е разрешено да се пренебрегне взаимодействието между електроните. Наред с това ние ще се възползуваме от възможността да покажем някои нови приложения на теорията, описваща разпространението на частиците. Тъй като и тук, както преди, ние ще продължаваме да пренебрегваме взаимодействието между частиците, фактически в тази глава ще има много малко ново, може би само новите приложения. Обаче в първия пример, който ние искаме да разгледаме, има възможност съвсем точно да се напишат правилни уравнения и в случая, когато „частиците" са повече от една. От тях ние ще можем да видим как се осъществява приближението, в което се пренебрегва взаимодействието. Впрочем ние няма да анализираме твърде подробно тази проблема.

Като първи пример ще разгледаме „спиновата вълна" във феромагнитен кристал.

Теорията на феромагнетизма беше засегната в гл. 36 (т. II). При нулева температура всички електронни спинове, които дават принос към магнетизма на целия феромагнитен кристал, са успоредни помежду си. Между спиновете има взаимодействие с определена енергия, която е най-малка тогава, когато всички спинове са насочени надолу. Но при нулева температура има някаква вероятност за това една част от спиновете да обърнат своята посока. Ние тогава пресметнахме приблизително тази вероятност. Този път ние ще развием квантовомеханична теория на явлението, за да знаем какво да правим, ако задачата трябва да се реши по-точно. Но ние все още ще прибягваме към идеализация: ще считаме, че електроните са разположени близо до атомите и спиновете взаимодействуват само със своите съседи.

Да разгледаме такъв модел: нека във всеки атом всички електрони освен един са сдвоени и целият магнитен ефект се дължи на това, че във всеки атом остава един несдвоен електрон със спин 1/2. Да си представим още, че тези електрони са разположени в същите възли на решетката, където се намират атомите. Моделът в общи линии отговаря на кристала на метала никел.

Освен това да допуснем, че всяка двойка въртящи се електрони-съседи взаимодействуват помежду си и че всички тези взаимодействия добавят към енергията на системата член от вида

$$E=-\sum_{i,j} K\vec{\sigma}_i\cdot\vec{\sigma}_j. \tag{13.1}$$

Тук $\vec{\sigma}$ е спинът на електрона, а сумирането е разпространено по всички двойки електрони-съседи. Ние вече говорихме за подобен род енергия на взаимодействие, когато разглеждахме свръхфиното разцепване на водородния спектър, предизвикано от взаимодействието на магнитните моменти на електрона и протона в атома на водорода. Тогава ние изразявахме това във вида

$A\vec{\sigma}_e \cdot \vec{\sigma}_p$. Този път за дадена двойка, да речем за електроните от атом №4 и от атом №5, хамилтонианът има вида $-K\vec{\sigma}_4\vec{\sigma}_5$. Всяка такава двойка дава по едно събираемо, а пълният хамилтониан на този тип взаимодействие (както това е с класическите енергии) е сумата на тези събираеми за всяка взаимодействуваща двойка. Енергията е написана с множител $-K$, така че положително K отговаря на феромагнетизъм, т. е. на този случай, когато най-ниска енергия се получава при еднопосочност на съседните спинове. В реалния кристал могат да се появят и други събираеми — взаимодействие със съседите *през един* и т. н., — но в нашия случай такива усложнения не са необходими.

Разполагайки с хамилтониана (13.1), ние имаме възможност пълно да опишем феромагнетика (в рамките на нашето приближение), така че от него трябва да се получат всички магнитни свойства. Освен това също оттук трябва да се получат и термодинамичните свойства при намагнитване. Ако ние съумеем да определим всички енергетични нива, тогава става възможно да се намерят и свойствата на кристала при температура T въз основа на известното положение, че вероятността системата да се окаже в дадено състояние с енергия E е пропорционална на $e^{-E/\varkappa T}$. Тази задача никога не е била решена докрай.

Някои задачи може да бъдат разяснени с помощта на простия пример, когато всички атоми лежат на една права — случай на едномерна решетка. Всички тези представи вие после лесно можете да пренесете за случая на тримерни решетки. Около всеки атом има електрон; за него има две възможни състояния — или със спин нагоре, или със спин надолу — и цялата система се описва, като се изброят посоките на спиновете. В качеството на хамилтониан на системата вземаме оператора на енергията на взаимодействие. Интерпретирайки спиновите вектори (13.1) като сигма-оператори или сигма-матрици, ние можем да напишем за линейната решетка

$$\hat{H} = \sum_n \left(-\frac{A}{2} \hat{\vec{\sigma}}_n \cdot \hat{\vec{\sigma}}_{n+1} \right). \tag{13.2}$$

В това уравнение множителят $A/2$ е написан за удобство (така че някои от по-нататъшните уравнения ще съвпаднат точно с уравненията от гл. 11).

Кое е най-ниското състояние на системата? Състояние с най-малка енергия е онова състояние, в което всички спинове са успоредни, например всички са насочени нагоре[1]. Това състояние може да се бележи със символа $|\ldots + + + \ldots>$ или $|$ осн.$>$, за да се подчертае, че то е основно, най-ниско. Лесно е да си представим енергията на това състояние. Може например да се изразят всички сигма-вектори чрез $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ и $\hat{\sigma}_z$ и внимателно да се пресметне какъв е приносът на всеки един от тях в енергията на основното състояние, а всичко след това да се събере. Този път обаче може силно да се скъси. В гл. 10, §2 ние видяхме, че произведението $\hat{\vec{\sigma}}_i \cdot \hat{\vec{\sigma}}_j$ може да бъде изразено чрез спин-обменния оператор на Паули:

$$\hat{\vec{\sigma}}_i \cdot \hat{\vec{\sigma}}_j = 2\,(\hat{P}_{ij}^{\text{спин-обм.}} - 1), \tag{13.3}$$

където операторът $P_{ij}^{\text{спин-обм.}}$ обменя спиновете на i-я и j-я електрони. След тази замяна хамилтонианът приема вид

$$\hat{H} = -A \sum_n \left(\hat{P}_{n,\,n+1}^{\text{спин-обм.}} - \frac{1}{2} \right). \tag{13.4}$$

[1] Основното състояние тук всъщност е „изродено". Съществуват и други състояния със същата енергия, например когато всички спинове са насочени надолу или някоя друга произволна посока. Но включването на едно колкото и да е слабо външно поле по посока на оста z ще снабди всяко едно от тези състояния с различна енергия и истинско основно състояние ще се окаже точно това, което ние избрахме.

Сега вече е лесно да се каже какво става в различните състояния. Например, ако i и j са насочени нагоре, обменът на спиновете нищо не изменя, така че операторите $\hat{P}_{ij}$, действувайки на състоянието, довеждат отново до същото състояние, т. е. това действие на операторите е равнозначно с умножаване с $+1$. Изразът $\hat{P}_{ij} - {}^1/_2$ просто е равен на ${}^1/_2$. (По-нататък ние няма да пишем думата „спин-обм".)

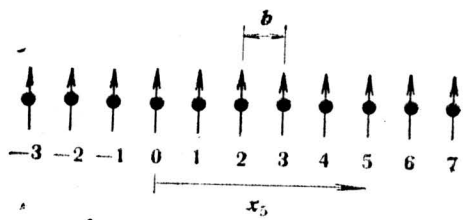
В основното състояние всички спинове са насочени нагоре; значи обменът между коя да е двойка спинове отново води към основното състояние. Основното състояние е стационарно. Ако на него подействуваме с хамилтониана, ще се получи отново същото състояние, умножено по сумата от числата $-(A/2)$, по едно за всяка двойка спинове. С други думи, енергията на системата в основно състояние е съставена от по $-A/2$ за всеки атом.

Сега да пресметнем енергиите на някои възбудени състояния. Удобно ще бъде енергията да се отчита от основното състояние, т. е. в качеството на нулева енергия да се избере енергията на основното състояние. Това може да се постигне, като към всяко събираемо на хамилтониана се добави енергия $A/2$. Тогава ${}^1/_2$ в (13.4) просто се заменя с единица. Нашият нов хамилтониан ще бъде равен на

$$\hat{H} = -A \sum_n (\hat{P}_{n,\ n+1} - 1). \tag{13.5}$$

При такъв хамилтониан енергията на низшето състояние е равна на нула; спин-обменният оператор е равнозначен с умножение с единица (за основното състояние), който резултат се унищожава с единицата във всяко събираемо.

За описание на състоянията, различни от основното, на нас ще ни е необходима друга съвкупност от базисни състояния. Удобно е да се подходи така: да се групират състоянията в съответствие с това, колко електрони са със спинове, насочени надолу: един, два и т. н. Разбира се, състоянията, в които един спин е насочен надолу, са много: той може да бъде спин на електрона от атом № 4 или атом № 5, или № 6. . . И, разбира се, в качеството на базисни състояния може да бъдат избрани именно тези състояния, означени със символите $|4>$, $|5>$, $|6>$, . . . Обаче за удобство по-нататък ние ще отбелязваме „излезлия от строя атом" (този, чийто спин е насочен надолу) с неговата координата x. С други думи, ние определяме състоянието $|x_5>$ като такова, в което всички електрони се въртят със спинове, насочени нагоре, и само един (този, който е около атома в точка x_5) се върти със спин, насочен надолу (фиг. 13.1). Въобще $|x_n>$ ще означава състояние с един преобърнат спин, разположен около n-тия атом с координата x_n.



Фиг. 13.1. Базисното състояние $|x_5>$ на система от спинове, разположени в една линия. Всички спинове са насочени нагоре, а спинът в точка x_5 е обърнат надолу

Как действува хамилтонианът (13.5) на състоянието $|x_5>$? Един от членовете на хамилтониана е например $-A(\hat{P}_{7,8} - 1)$. Операторът $\hat{P}_{7,8}$ обменя спиновете на двата съседни атома с номера 7 и 8. Но в състоянието $|x_5>$ спиновете на тези два атома са насочени нагоре, така че нищо не се изменя; $\hat{P}_{7,8}$ е еквивалентно на умножение с единица

$$\hat{P}_{7,8} |x_5> = |x_5>.$$

Оттук следва, че

$$(\hat{P}_{7,8} - 1) |x_5> = 0.$$

Следователно всички членове на хамилтониана, освен тези, в които влиза атом № 5, ще дадат нула. Операторът $\hat{P}_{4,5}$, като действува на състоянието $|x_5>$, обменя спиновете на атом № 4 (със спин нагоре $>$ и атом № 5 (със спин надолу). Като резултат от тази операция се появява състояние, в което всички спинове са насочени нагоре, освен спина на атома в точка x_4.
С други думи,

$$\hat{P}_{4,5} \mid x_5\rangle = \mid x_4\rangle .$$

Точно така

$$\hat{P}_{5,6} \mid x_5\rangle = \mid x_6\rangle .$$

Следователно от целия хамилтониан остават само членовете $-A(\hat{P}_{4,5}-1)$ и $-A(\hat{P}_{5,6}-1)$. Действувайки на $\mid x_5\rangle$, те дават съответно $-A \mid x_4\rangle + A \mid x_5\rangle$ и $-A \mid x_6\rangle + A \mid x_5\rangle$. Общо получаваме

$$\hat{H} \mid x_5\rangle = -A \sum_n (\hat{P}_{n,\ n+1}-1) \mid x_5\rangle$$

$$= -A\{ \mid x_6\rangle + \mid x_4\rangle - 2 \mid x_5\rangle\}. \qquad (13.6)$$

Когато хамилтонианът действува на състоянието $\mid x_5\rangle$, възниква известна амплитуда за преход в състоянията $\mid x_4\rangle$ и $\mid x_6\rangle$. Това просто означава, че съществува определена амплитуда насоченият надолу спин да премине към съседния атом. Значи поради взаимодействието между спиновете, ако първоначално един спин е бил насочен надолу, има някаква вероятност за това по-късно вместо него надолу да е ориентиран друг. При действие на състоянието $\mid x_n\rangle$ хамилтонианът дава

$$\hat{H} \mid x_n\rangle = -A\{ \mid x_{n+1}\rangle + \mid x_{n-1}\rangle - 2 \mid x_n\rangle\}. \qquad (13.7)$$

Забележете в частност, че ако се вземе пълна система състояния само с по един обърнат надолу спин, тези състояния могат да се смесват само помежду си. Хамилтонианът никога не може да смеси тези състояния с други, в които обърнатите надолу спинове, са повече от един. Докато се осъществява обмен само на спинове, никога не може да се измени общото количество обърнати надолу спинове. Удобно е да се използуват матрични означения за хамилтониана, например $H_{n,\ m} \equiv \langle x_n \mid \hat{H} \mid x_m\rangle$. Тогава уравнението (13.7) е еквивалентно на следното

$$H_{n,\ n} = 2A, \quad H_{n,\ n+1} = H_{n+1,\ n} = -A,$$

$$H_{n,\ m} = 0 \text{ за } \mid n-m \mid > 1. \qquad (13.8)$$

Какви са сега енергетичните нива за състоянията с един преобърнат спин? Нека както обикновено C_n е амплитудата за това някое състояние $\mid \psi\rangle$ да се намира в състоянието $\mid x_n\rangle$. Ако ние искаме $\mid \psi\rangle$ да е състояние с определена енергия, всички C_n трябва да се изменят по един и същи начин с времето, а именно по правилото

$$C_n = a_n e^{-iEt/\hbar}. \qquad (13.9)$$

Да заместим това пробно решение в нашето уравнение на Хамилтон

$$i\hbar \frac{dC_n}{dt} = \sum_m H_{nm} C_n, \qquad (13.10)$$

използувайки в качеството на матрични елементи (13.8). Ние, разбира се, ще получим безкрайно много уравнения, но всички те може да бъдат записани във вида

$$Ea_n = 2Aa_n - 2Aa_{n-1} - Aa_{n+1}. \qquad (13.11)$$

Пред нас отново е съвсем същата задача, както в гл. 11; само там, където по-рано стоеше E_0, сега стои $2A$. Решенията съответствуват на амплитуди C_n (амплитуди с преобърнати спинове), които се разпространяват по дължината на решетката с константа на разпространението k и енергия

$$E = 2A(1 - \cos kb), \qquad (13.12)$$

където b е константата на решетката.

Решенията с определена енергия съответствуват на „вълни“ на преобърнат спин, наричани „спинови вълни“. И за всяка дължина на вълната има съответна енергия. За големи дължини на вълната (малки k) тази енергия се мени по закона

$$E = Ab^2k^2. \tag{13.13}$$

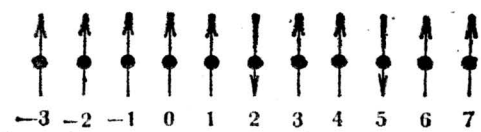
Както и по-рано, ние можем сега да вземем локализиран вълнов пакет (съдържащ обаче само дълги вълни), който съответствува на това, че електронът с преобърнат спин се оказва в дадена част на решетката. Този преобърнат спин ще има поведението на „частица“. Тъй като енергията на тази „частица“ е свързана с k посредством формулата (13.13), нейната ефективна маса ще бъде

$$m_{\text{еф}} = \frac{\hbar^2}{2Ab^2}. \tag{13.14}$$

Понякога тези частици се наричат „магнони“.

13-2. Две спинови вълни

Сега ние бихме искали да изясним какво става, когато има два обратно ориентирани спина. Отново ще започнем с избор на системата на базисните състояния. Избираме за такива състоянията, в които спиновете в две произволни точки са обратно ориентирани (така, както на фиг. 13.2). Тези състояния може например да се бележат с x-координатите на двата възела от решетката, в които се намират електроните с преобърнати спинове. Това, което е на фигурата, може да се запише с помощта на символа $|x_2, x_5\rangle$. В общия случай базисните състояния са $|x_n, x_m\rangle$ — два пъти безкрайна съвкупност! При този начин за записване състоянието $|x_4, x_9\rangle$ и състоянието $|x_9, x_4\rangle$ съвпадат, защото всяко от тях просто говори, че в точките 4 и 9 спиновете са преобърнати; техният ред при записването няма значение. От друга страна, състояния от типа на $|x_4, x_4\rangle$ нямат смисъл — такива просто не може да има. Произволно състояние $|\psi\rangle$ може да се опише, като се зададе амплитудата за това то да се намира в едно кое да е базисно състояние.



Фиг. 13.2. Състояния с два преобърнати спина

И тъй $C_{m,n} = \langle x_m, x_n | \psi\rangle$ сега означава амплитудата за това, че системата в състояние $|\psi\rangle$ ще се окаже в състояние, когато електроните, намиращи се около m-ия и n-ия атоми, имат спинове, обърнати надолу. Сложностите, които сега ще възникнат, ще са свързани не с усложнението на идеите, а това ще бъдат просто някои усложнения в счетоводството. (Една от трудностите на квантовата механика се състои именно в сложността на нейното счетоводство. Колкото повече спинове са обратно ориентирани, толкова по-сложни стават означенията, толкова повече индекси възникват, толкова по-страшни изглеждат уравненията; но от това съвсем не следва, че самите идеи са се усложнили.)

Уравненията на движение на спинова система са диференциалните уравнения за $C_{n,m}$:

$$i\hbar \frac{dC_{n,m}}{dt} = \sum_{ij} (H_{nm,ij})\, C_{ij}. \tag{13.15}$$

Нека отново потърсим стационарни решения. Както обикновено, производните по времето ще се обърнат в E, умножено по амплитудата, а вместо $C_{n,m}$ ще се появят коефициентите $a_{n,m}$. След това трябва грижливо да се пресметне действието на H върху състоянието с преобърнати спинове m и n. Това може лесно да се направи. Представете си за малко, че m е далеч от n, така че не трябва да се мисли какво ще бъде, ако ... и т. н. Обменната операция, която се извършва в точка x_n, ще придвижи преобърнатия спин или към $(n+1)$-ия, или към $(n-1)$-ия

атом, така че има ненулева амплитуда затова сегашното състояние да се е получило от състоянието $|x_m, x_{n+1}\rangle$ и ненулева амплитуда затова то да е произлязло от състоянието $|x_m, x_{n+1}\rangle$. Но и вторият спин може да се предвижи, така че не е изключена и някаква амплитуда за това, че $C_{m,n}$ се подхранва от $C_{m+1,n}$ или от $C_{m-1,n}$. Всичките тези ефекти трябва да бъдат еднакви.

Окончателният вид на хамилтоновото уравнение за $C_{m,n}$ е следният:

$$Ea_{m,n} = -A(a_{m+1,n} + a_{m-1,n} + a_{m,n+1} + a_{m,n-1}) + 4a_{m,n}. \tag{13.16}$$

Това уравнение е годно за всички случаи, с изключение на два. При $m=n$ въобще няма уравнение, а при $m=n\pm1$ два от членовете в (13.16) изчезват. *Ние ще пренебрегнем тези изключения.* Ние просто ще игнорираме факта, че някои от тези уравнения се изменят леко. Нали при това кристалът се приема за безкраен и събираемите в хамилтониана са безбройно много; пренебрегването на известен брой от тях едва ли ще се отрази съществено на нещо. И тъй в първо грубо приближение нека забравим за измененията на уравненията. С други думи, нека допуснем, че (13.16) е вярно при всички m и n дори когато m и n стоят едно до друго. *Това е най-същественото в нашето приближение.*

Сега вече решението може да се намери лесно. Ние получаваме незабавно

$$C_{m,n} = a_{m,n} e^{-iEt/\hbar}, \tag{13.17}$$

където

$$a_{m,n} = (\text{константа})\, e^{ik_1 x_m} e^{ik_2 x_n}, \tag{13.18}$$

а

$$E = 4A - 2A\cos k_1 b - 2A\cos k_2 b. \tag{13.19}$$

Да поразмислим малко за това, какво би било, ако ние имахме две *независими отделни* спинови вълни (както в предходния параграф), съответстващи на $k=k_1$ и $k=k_2$; техните енергии съгласно (13.12) биха имали вида

$$\varepsilon_1 = 2A - 2A\cos k_1 b$$

и

$$\varepsilon_2 = 2A - 2A\cos k_2 b.$$

Забележете, че енергията E в (13.19) е точно сумата на тези енергии:

$$E = \varepsilon(k_1) + \varepsilon(k_2). \tag{13.20}$$

С други думи, нашето решение може да се тълкува по следния начин: Съществуват две частици, т. е. двойка спинови вълни, едната от които има импулс, зададен с числото k_1, а другата — импулс, зададен с k_2; енергията на системата е равна на сумата от енергиите на тези обекти. Двете частици действуват съвсем независимо. Ето всичко, което се съдържа тук — нищо повече.

Разбира се, ние направихме някои приближения, но сега няма да обсъждаме точността на получения отговор. Вие обаче чувствувате, че в кристалите с реални размери, в които има милиарди атоми и следователно има милиарди събираеми, и в хамилтониана голяма грешка не може да се получи при пренебрегването на малък брой събираеми. Ако обаче спиновете с обратна ориентация са много, така че тяхната плътност е значителна, тогава би се наложило да се погрижим и за поправките.

(Интересно е, че в случая, когато обратно ориентираните спинове са само *два*, може да се напише точно решение. Но резултатът не е от особена важност. Просто е интересно, че в този случай уравненията може да се решат точно. Решението е следното

$$a_{m,\,n}=e^{ik_c\,(xm+x)\,n}\sin k\mid x_m-x_n\mid \qquad (13.21)$$

с енергия

$$E=4A-2A\cos k_1b-2A\cos k_2b$$

и с вълнови числа k_c и k, свързани с k_1 и k_2 посредством формулите

$$k_1=k_c-k, \qquad k_2=k_c+k. \qquad (13.22)$$

В това решение е отразено „взаимодействието“ на двойката спинове. В него е отразен и този факт, че когато спиновете се приближават, възниква някаква вероятност за взаимното им разсейване. Поведението на спиновете много прилича на взаимодействието на частици. Но една подробна теория на тяхното разсейване излиза от границите на това, за което ние искаме да говорим тук.)

13-3. Независими частици

В предходния параграф ние написахме хамилтониана (13.15) за двучастична система. След това, използувайки едно приближение еквивалентно на пренебрегването на всякакво „взаимодействие“ между двете частици, ние намерихме стационарните състояния, които се описват от формулите (13.17) и (13.18). Това са просто произведения на две едночастични състояния. Но решението, което ние написахме за $a_{n,\,m}$ [формула (13.18)], фактически не може да ни удовлетвори. Ние от самото начало обръщахме внимание на това, че състоянието $\mid x_9,\ x_4>$ *не се различава* от състоянието $\mid x_4,\ x_9>$, че *редът* на x_m и x_n не е от значение. Въобще алгебричният израз за амплитудата $C_{m,\,n}$ не трябва да се мени при транспониране на стойностите на x_m и x_n, защото това не изменя състоянието. Във всеки случай тя ще представлява амплитудата за това, че спинът, който е насочен надолу, ще се окаже в точките x_m и x_n. Но обърнете внимание на това, че формулата (13.18) *не е симетрична* относно x_m и x_n, тъй като k_1 и k_2 въобще са различни.

Цялата работа е там, че ние не заставихме нашето решение (13.15) да се подчини на това добавъчно условие. За щастие все още е лесно всичко да се поправи. Забележете най-напред, че друго едно решение на уравнението на Хамилтон, а именно:

$$a_{m,\,n}=Ke^{ik_2x_m}e^{ik_1x_n}, \qquad (13.23)$$

не е с нищо по-лошо от (13.18). Дори енергията тук е съвсем същата, както за случая (13.18). Значи, произволна линейна комбинация на (13.18) и (13.23) също ще бъде решение на системата и ще има, както преди, енергия, която се дава от (13.19). Решението, което трябва да се избере според изискванията за симетрия, е просто сумата на (13.18) и (13.23).

$$a_{m,\,n}=K\left[e^{ik_1x_m}e^{ik_2x_n}+e^{ik_2x_m}e^{ik_1x_n}\right]. \qquad (13.24)$$

Сега при зададени k_1 и k_2 амплитудата $C_{m,\,n}$ не зависи от това, в каква последователност вземаме x_m и x_n; ако случайно поставим x_m и x_n в обратен ред, получаваме същата амплитуда. И нашето тълкуване на уравнението (13.24) на езика на „магнонитe“ също става друго. Вече не бива да се говори, че уравнението описва поведението на *една* частица с вълново число k_1 и на *друга* частица с вълново число k_2. Амплитудата (13.24) представлява *едно* състояние с две частици (магнони). *Състоянието* се характеризира с две вълнови числа k_1 и k_2. Нашето решение изглежда като съставно състояние на една частица с импулс $p_1=k_1/\hbar$ и на друга частица с импулс $p_2=k_2/\hbar$, но в това състояние не може да се каже коя частица къде се намира.

В този момент е полезно да си спомним гл. 2 и нашия разказ за тъждествените частици. Ние току-що показахме, че частиците —

спинови вълни (магнони) просто имат поведението на тъждествени бозе-частици. Всички амплитуди трябва да бъдат симетрични относно координатите на двете частици; това е все едно да кажем, че след „обмена на двете частици“ ние отново ще получим същата амплитуда със същия знак. Но вие може да попитате: „Защо все пак ние решихме да *съберем* двата члена в (13.24)? Защо да не ги извадим?“ Наистина при знак минус обменът между x_m и x_n просто би изменил знака на $a_{m,n}$, а това не влиза в сметката, това няма никакво значение. Но нали обменът между x_m и x_n *нищо не изменя* — всички електрони на кристала ще си останат там, където са били, така че дори за изменяне на знака като че ли няма никакъв повод. Но това, разбира се, е неубедителен аргумент[1].

Направеното обсъждане имаше двояка цел: първо, да ви бъде разказано нещо за спиновите вълни; второ, да бъде показано състояние, чиято амплитуда е равна на *произведението* на две амплитуди, а енергията му — на сумата на енергиите, съответствуващи на тези амплитуди. При *независими частици* амплитудата се получава чрез умножение, а енергията — чрез събиране Защо чрез събиране — лесно може да се разбере. Енергията е коефициентът при t в имагинерния показател на експонентата; тя е пропорционална на честотата. Ако с двойката обекти нещо става, при единия с амплитуда $e^{-iE_2t/\hbar}$, а при другия с амплитуда $e^{-iE_1t/\hbar}$ и ако амплитудата за това, че тези два процеса протичат заедно, е пропорционална на произведението на отделните амплитуди, в произведението ще се появи единствена честота, равна на сумата на двете честоти. Енергията, съответствуваща на произведението на амплитудите, е равна на сумата от двете енергии.

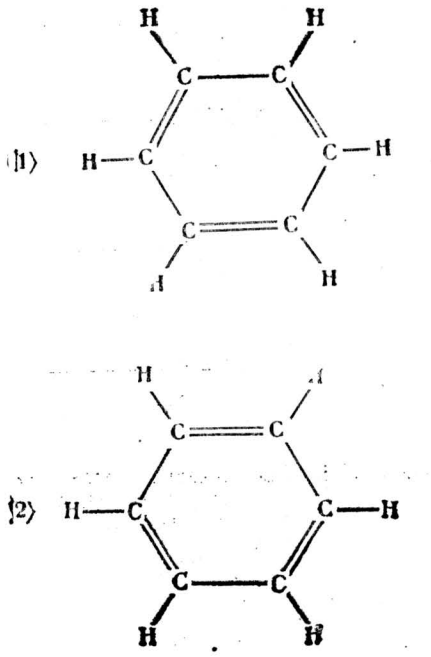
Ние трябваше доста дълго да говорим, за да съобщим нещо много просто, а именно, че когато вие не вземате под внимание взаимодействието между частиците, вие имате право да разглеждате всяка частица независимо. Двете частици могат да съществуват отделно във всевъзможни състояния, в които те биха пребивавали и отделно и да дават същия принос към енергията, който биха давали поотделно. Трябва да се помни обаче, че ако частиците са тъждествени, те могат да имат поведението на бозе- или ферми-частици в зависимост от задачата. Например двойка електрони, вкарани в кристал, имат поведение на ферми-частица. Транспонирането на двата електрона води до изменяне на знака на амплитудата. В уравнението, съответствуващо на (13.24), между двете събираеми стои знак минус. Като следствие от това двете ферми-частици не могат да съществуват при едни и същи условия — с еднакви спинове и еднакви k. Амплитудата на такова едно състояние е равна на нула.

13-4. Молекула на бензола

Независимо от това, че квантовата механика ни дава основните закони, определящи строежа на молекулите, тези закони обаче се прилагат с успех точно само за най-простите съединения. Ето защо химиците са разработили различни приблизителни начини за пресмятане на някои от свойствата на молекулите. Ние искаме да разкажем тук как химиците-органици прилагат приближението на независимите частици. Ще започнем с молекулата на бензола. Ние я разглеждахме от друга гледна точка в гл. 8. Тогава се възползувахме от приблизителното представяне на молекулата във вид на система от две състояния; нейните

[1] Квазичастиците от обсъждания тук тип могат да имат поведението както на бозе-така и на ферми-частици; и както е при свободните частици, така е и тук: частиците с цял спин са бозони, с полуцял — фермиони. „Магнонът“ символизира това, че един електрон със спин насочен нагоре се преобръща надолу. Спинът при това се *изменя с единица*. Следователно спинът на магнона е целочислен и той е бозон.

базисни състояния са показани на фиг. 13.3. Имаме пръстен от шест въглеродни атома, като към всеки от тях е прикрепен по един водороден атом. Според приетата схема на валентните връзки трябва да се допусне, че между половината въглеродни атоми има двойни връзки и че при нискоенергетични условия възникват двете възможности, показани на фигурата. Но освен това има и други, по-високоенергетични състояния. Когато ние говорихме за молекулата на бензола в гл. 8, ние използувахме само две състояния, а от останалите не се интересувахме. И ние установихме, че енергията на основното състояние на молекулата не съвпада с енергията на нито едно от нарисуваните състояния; тя се оказва по-ниска с величина, пропорционална на амплитудата на вероятността за преминаване на едното състояние в другото.

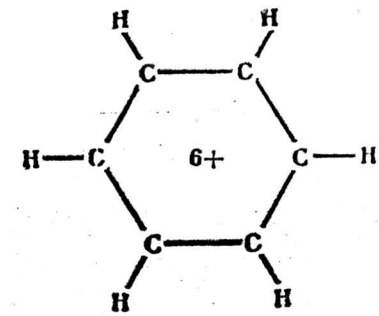


Фиг. 13.3. Две безисни състояния на молекулата на бензола, използувани в глава 8

А сега ние искаме да разгледаме същата молекула от съвсем друга гледна точка, използувайки друг вид приближение. Двете гледни точки водят към различни отговори, но когато ние усъвършенствуваме двете приближения, ще се доберем до истината — до правилното описание на бензола.

Ако не се погрижим обаче за тези усъвършенствувания (което обикновено не се прави), не трябва да се удивляваме, че тези описания ще дадат различни резултати. Ние ще покажем поне, че при новото разглеждане най-ниската енергия на молекулата на бензола се оказва по-ниска от енергията на коя да е от структурите с три двойни връзки (вж. фиг. 13.3).

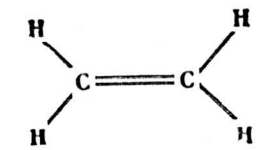
Да разгледаме следната картина: Нека си представим шестте водородни атома, свързани само с единични връзки (фиг. 13.4). Ние премахваме по този начин шест електрона (тъй като всяка връзка означава двойка електрони), така че пред нас е шестократно йонизирана молекула на бензола. Сега да видим какво ще се случи, когато връщаме по един всичките шест електрона в молекулата, считайки, че всеки от тях може свободно да се движи около пръстена. Да допуснем също, че всички връзки, показани на фиг. 13.4, са запълнени и не се нуждаят от по-нататъшно разглеждане. Какво става, когато ние връщаме на молекулярния йон един негов електрон? Той, разбира се, може да се разположи на кое да е от шестте места на пръстена, съответствуващи на шестте базисни състояния. И за него ще има някаква амплитуда (да речем A) затова, че той ще премине от едно място на друго. При анализиране на стационарните състояния ще се забележат няколко възможни енергетични нива. Това има място само при един електрон.



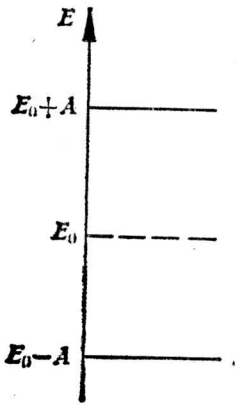
Фиг. 13.4. Бензолен пръстен, от който са отстранени шест електрона

Да добавим още един електрон. И да направим сега най-странното предположение: *това, което става единия електрон, не се отразява на това, което става с другия.* Всъщност те, разбира се, ще си взаимодействуват; те се отблъскват един от друг чрез кулонови сили и освен това тяхната енергия, когато попаднат на едно и също място, трябва забележимо да се различава от удвоената енергия за случая, когато те попаднат на това място поотделно. Разбира се, приближението на независимите частици е невалидно, когато местата са само шест, особено когато на тези места се иска да бъдат поместени и *шестте* електрона. Но независимо от това химиците-органици са съумели да научат много неща, правейки именно такова приближение.

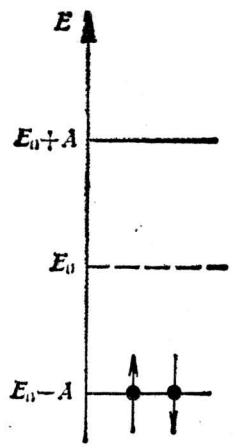
Преди да направим подробни пресмятания за молекулата на бензола, ще вземем по-прост пример – молекулата на етилена. В нея влизат само два въглеродни атома и по една двойка водородни атоми от всяка страна (фиг. 13.5). Молекулата има една „излишна“ връзка между двата въглеродни атома, в която влизат два електрона. Да премахнем един от тези електрони; какво ще получим? Това, което остава, може да бъде разглеждано като система с две състояния: останалият електрон може да се намира или около единия атом, или около другия. И както при всяка система с две състояния, допустимите енергии на отделния



Фиг. 13.5. Молекула на етилена



Фиг. 13.6. Възможните енергетични нива на „излишния" електрон в молекулата на етилена



Фиг. 13.7. В добавъчната връзка на молекулата на етилена два електрона (единият със спин нагоре, другият със спин надолу) могат да заемат най-ниското енергетично ниво

електрон може да бъдат равни или на $E_0 - A$, или на $E_0 + A$ (фиг. 13.6).

Да добавим сега втория електрон. Всичко е много добре: ние имаме два електрона – първият може да се постави в долното състояние, а вторият в горното, нали така? Но не съвсем — ние забравихме нещо. Нали всяко от състоянията всъщност е двойно. Когато говорим, че е допустимо едно състояние с енергия $E_0 - A$, в действителност това съответствува на двойка състояния. В едно и също състояние могат да попаднат два електрона — единият със спин, насочен нагоре, другият със спин надолу (но не повече поради принципа за забрана). Така че всъщност има две възможни състояния с енергия $E_0 - A$. Може да бъде начертана диаграма (фиг. 13.7), която показва и енергетичните нива, и тяхната населеност. В състоянието с най-малка енергия двата електрона ще бъдат на най-ниското ниво с противоположни спинове. Ето защо енергията на „излишната" връзка в молекулата на етилена е равна на $2(E_0 - A)$, ако се пренебрегне взаимодействието между двата електрона.

Сега да се върнем към бензола. Всяка от двете състояния на фиг. 13.3 има три двойни връзки. И всяка от тях много прилича на етиленовата връзка и дава принос към енергията $2(E_0 - A)$, където сега E_0 е вече енергията, необходима за поместването на електрона в бензола на нужното място, а A е амплитудата за прехвърлянето на този електрон на съседното място. Значи енергията трябва да бъде равна примерно на $6(E_0 - A)$. Но когато ние по-рано изучавахме бензола, ние стигнахме до извода, че неговата енергия е по-ниска от енергията на структурата с три двойни връзки. Да видим ще се получи ли сега при това ново разглеждане по-ниска енергия за бензола, отколкото при три двойни връзки.

Започваме шесткратно йонизиран бензолен пръстен. Добавяме един елекрон. Сега имаме система със шест състояния. Ние досега не сме решавали задача за такива системи, но знаем какво трябва да се направи. Можем да напишем шест уравнения за шест амплитуди и т. н. Но не е ли по-добре да си спестим тези сили, нали ние вече решихме тази задача, изследвайки електрона в безкрайна верига атоми? Разбира се, бензолът не е безкрайна верига, шестте места на атомите при него са разположени в кръг. Но представете си, че ние сме разгънали пръстена във вид на верига и сме номерирали атомите по нейната дължина от 1 до 6. В една безкрайна линия следващото място би имало номер 7, но ако ние се условим, че то съвпада с мястото с номер 1 и т. н., всичко ще се окаже точно така, както при бензолния пръстен. С други думи, ние можем да вземем решението, съответствуващо на безкрайна верига с *добавъчното изискване* решението да е периодично с период, равен на интервала, заеман от шест атома. Съгласно гл. 11 електронът върху правата се намира в състояния с определена енергия, когато амплитудата за това той да се окаже на някое място x_n е равна на $e^{ikx_n} = e^{ikbu}$. При всяко k енергията е

$$E = E_0 - 2A \cos kb. \tag{13.25}$$

Сега от тези решения трябва да се оставят само онези, които след всеки 6 атома се повтарят. Да разгледаме най-напред общия случай, когато в пръстена има N атома. Ако решението трябва да има период с дължина, равна на N атомни разстояния, e^{ikbN} трябва да бъде равно на единица, или все едно kbN трябва да е кратно на 2π. Ако s е произволно цяло число, нашето условие има вид

$$kbN = 2\pi s. \tag{13.26}$$

Ние по-рано видяхме, че няма смисъл k да се взема извън границите $\pm\pi/b$. Това означава, че ние ще получим всички възможни състояния, като вземем стойностите на s в границите $\pm N/2$.

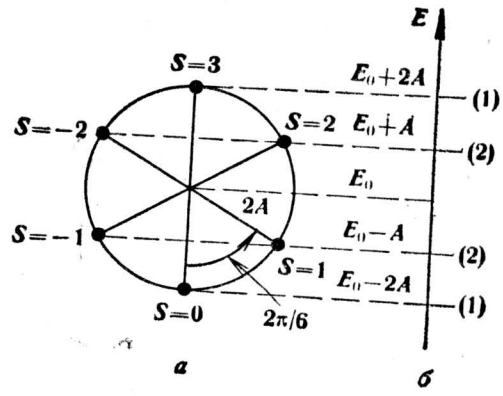
Следователно ние стигаме до извода, че един N атомен пръс-

тен има N състояния с определена енергия[1], като техните вълнови числа k_s се получават от равенството

$$k_s = \frac{2\pi}{Nb} s \,. \qquad (13.27)$$

Енергията на всяко състояние се дава с формулата (13.25). Получава се линеен спектър на енергетичните нива. Спектърът за бензола ($N=6$) е показан на фиг. 13.8, *б*. (Числата в скоби показват броя на *различните* състояния с една и съща енергия.)

Има нагледен начин за изобразяване на тези шест енергетични нива. Той е даден на фиг. 13.8, *а*. Да си представим кръг с център, лежащ на линията на енергетичното ниво E_0, и с радиус $2A$. Ако нанесем, започвайки от най-ниската точка на кръга, шест равни дъги, всяка една от които отговаря на ъгъл $k_s b = 2\pi s/N$ или на $2\pi s/b$ за бензола, то височините на точките от окръжността ще съответствуват на решенията (13.25). Най-ниското енергетично ниво е $E_0 - 2A$. По-нататък следват две състояния с еднакви енергии $E_0 - A$ и т. н.[2]. Това са възможните състояния на един електрон. Ако електроните са повече, а не един, то във всяко състояние могат да попаднат по два електрона с противоположни спинове.



Фиг. 13.8. Енергетичните нива в пръстен, в който за електрона са подготвени шест свободни места (например в бензолния пръстен)

В молекулата на бензола тук трябва да се поместят шест електрона. Ако състоянието е основно, те трябва да попаднат във възможно най-нискоенергетично състояние—двойка електрони в състояние с $s=0$, двойка с $s=+1$ и двойка с $s=-1$. Съгласно приближението на независимите частици енергията на основното състояние е равна на

$$E_{\text{осн}} = 2(E_0 - A) + 4(E_0 - A) = 6E_0 - 8A. \qquad (13.28)$$

Тя наистина се оказва по-малка от енергията на трите отделни двойни връзки с $2A$.

Като се сравни енергията на бензола с енергията на етилена, може да се определи A. Тази величина се оказва равна на 0,8 eV, или в единици, които се харесват на химиците — на 18 ккал/мол.

Това описание може да се използува, за да се пресметнат или разберат други свойства на бензола. Например, гледайки фиг. 13.8, може да се разбере процесът на възбуждане на бензола с помощта на светлина. Какво би станало, ако ние се опитаме да възбудим един от електроните? Той би могъл да се придвижи към едно от незаетите по-високи състояния. Преход с най-малка енергия на възбуждане би се оказал преходът от най-високото заето състояние към най-ниското незаето. Тази енергия е равна на $2A$. Бензолът ще поглъща светлина с честота $\nu = 2A/h$. Освен това ще се наблюдава също поглъщане на фотони с енергия $3A$ и $4A$. Няма какво да се говори за това, че спектърът на поглъщане на бензола е бил измерен и картината на спектралните линии се оказала повече или по-малко правилна, ако не се смята това, че най-ниските преходи се наблюдават в ултравиолетовата област и че за да се удовлетворят всички данни, налага се величината A да бъде приета за равна на 1,4—2,4 eV. С други думи, числената стойност на A е два три пъти по-голяма от предсказаната енергия на химическата връзка.

Как постъпва химикът в такива случаи? Той анализира множество молекули, които имат подобен вид, и извежда някакви емпирични правила. Той учи например: при пресмятане на енергията на връзката вие трябва да вземете една или друга стойност на A, а за да получите приблизително верен спектър на поглъщане, трябва да вземете съвсем друга стойност за A. На вас може да ви се стори, че това звучи малко абсурдно. И наистина в ушите на физика, който се опитва да обясни цялата природа на

---

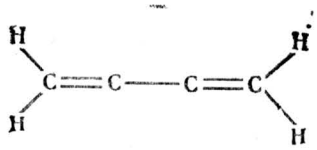
[1] Би могло да се помисли, че при четно N има $N+1$ състояния. Това не е така, понеже двете числа $s = \pm N/2$ дават едно и също състояние.

[2] Когато имаме двойка състояния (с различни разпределения на амплитудите) с една и съща енергия, ние казваме, че тази двойка е „изродена". Забележете, че енергия $E_0 - A$ могат да имат *четири* електрона.

основата на първоначалните принципи, това звучи доста странно. Но пред химика стои друга задача. Той трябва предварително да се досети какво ще стане с онези молекули, които досега не са съществували или които не може да бъдат разбрани докрай. На него му трябват ред емпирични правила и му е все едно те откъде ще се вземат. Така че той се ползува от теорията съвсем не тъй както физикът. Той взема уравненията, в които е отразена светлината на истината, а след това е принуден да изменя в тях константите, извършвайки емпирични поправки.

В случая с бензола основната причина за несъгласуваност лежи в нашето предположение, че електроните са независими; теорията, от която ние тръгнахме, всъщност не е законна. Въпреки това върху нея пада някакъв отблясък от истината, защото резултатите като че ли вървят във вярна насока. С помощта на такива уравнения плюс някои емпирични правила (с множество изключения) химикът-органик прокарва своя път през гъстата гора на сложните неща, които той се е заел да изучава. (Не забравяйте, че в действителност причината, поради която на физика му се удава да изведе нещо от основните принципи, се състои в това, че той избира само прости задачи. Той никога не решава задачи с 42 или дори с шест електрона. Досега той е съумял да пресметне с приличка точност само атома на водорода и атома на хелия.)

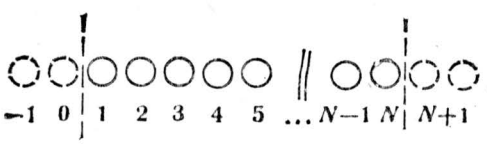
13-5. Още малко органична химия



Фиг. 13.9. Представяне на молекулата на бутадиен (1,3) с помощта на валентни връзки

Може ли тези идеи да бъдат приложени за изучаване на други молекули? Да разгледаме молекула, каквато е например молекулата на бутадиен (1,3); тя е показана на фиг. 13.9 с помощта на обикновена схема на валентните връзки.

Ние можем да започнем пак същата игра с добавъчната четворка електрони, съответстваща на двете двойни връзки. Ако те се премахнат, остават четири въглеродни атома в една линия. А как се пресмята такава линия, вие вече знаете. „Но извинете — ще кажете вие, — аз зная само как се решава задачата за *безкрайна* линия.“ Обаче решенията за безкрайната линия включват също и решения за крайна. Следете. Нека N е броят на атомите по правата; номерираме ги с числата 1,2,... (фиг. 13.10). В уравнението за амплитудата в точка *1* у вас няма да се появи член за преход от точката 0. Съвсем по същия начин уравнението за точка N ще се различава от това, което ние използувахме за безкрайна права, тъй като никакъв принос от точка $N+1$ няма да има. Но представете си, че ние сме измислили решение за безкрайната права със следното свойство: амплитудата за намиране на електрона около атома 0 е нула и амплитудата за намиране на електрона около атома $N+1$ е също нула. Тогава системата от уравненията за всички точки от 1 до N за крайната линия също ще се удовлетворява. Може да изглежда, че такива решения няма, тъй като всички наши решения имат вид e^{ikx_n} и имат навсякъде една и съща абсолютна стойност. Но спомнете си, че енергията зависи само от абсолютната стойност на k, така че друго законно и напълно равноправно решение би било e^{-ikx_n}. И същото е в сила за произволна суперпозиция на тези две решения. Изваждайки ги, ние ще получим решение $\sin \kappa x_n$, а то удовлетворява изискването при $x=0$ амплитудата да е равна на нула. При това то все още съответствува на енергия $E_0-2A\cos kb$. По-нататък, подбирайки по подходящ начин величината k, можем също да постигнем това, че амплитудата в точка x_{N+1} да е също нула. За това е необходимо числото $(N+1)kb$ да е кратно на π, т. е. да е удовлетворено условието



Фиг. 13.10. Отсечка от права с N молекули

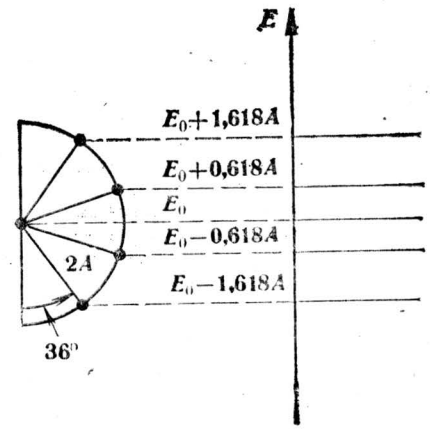
$$kb=\frac{\pi}{N+1}s, \qquad (13.29)$$

където s е цяло число между 1 и N. (Вземат се само положителни k, тъй като всяко решение съдържа и $+k$, и $-k$; изменянето на-

знака на k отново ще даде същото състояние.) За молекулата на бутадиена $N=4$, така че има място четворката състояния с

$$kb=\frac{\pi}{5},\ \frac{2\pi}{5},\ \frac{3\pi}{5}\ \text{и}\ \frac{4\pi}{5}. \qquad (13.30)$$

Енергетичните нива може сега да се представят, като се използува кръгова диаграма, подобна на бензолната. Този път ще вземем полукръг, разделен на пет равни части (фиг. 13.11). Най-долната точка съответствува на $s=0$, което не дава никакво състояние. Същото се отнася и за най-горната точка, отговаряща на $s=N+1$. Останалите четири точки дават четворката разрешени енергии. Има четири стационарни състояния — нещо, което трябва да се очаква, като се съди по четирите базисни състояния. На кръговата диаграма ъглите са равни на $\pi/5$, или 36°. Най-ниската енергия се оказва равна на $E_0-1{,}618\,A$. (Какви само чудеса няма в математиката! Златното сечение[1] на гърците ни дава най-ниското енергетично състояние на молекулата на бутадиена, както това следва от нашата теория!)



Фиг. 13.11. Енергетични нива на бутадиена

Сега вече е ясно как се мени енергията на молекулата на бутадиена, когато в нея се въвеждат четири електрона. Тази четворка ще запълни двете долни нива — всяко ниво ще бъде запълнено с по два електрона с противоположни спинове. Пълната енергия ще бъде равна на

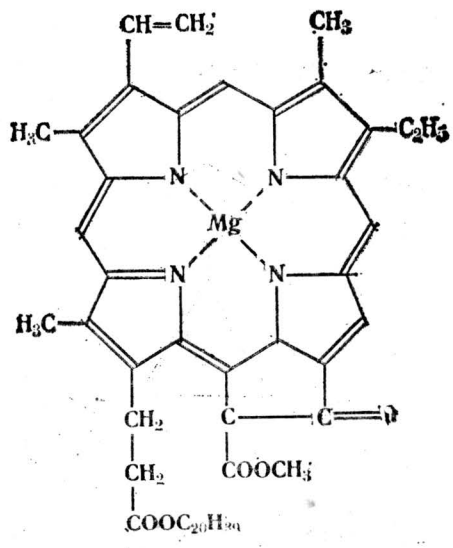
$$E=2(E_0-1{,}618A)+2(E_0-0{,}618A)=4(E_0-A)-0{,}477A. \qquad (13.31)$$

Това изглежда напълно разумно. Енергията е с малко по-малка от тази на двете двойни връзки, но връзката не е толкова силна, както при бензола. Във всеки случай именно така химикът - органик анализира някои органични молекули.

Но в негово разпореждане са не само енергиите, но и вероятностните амплитуди. Като знае амплитудата за всяко състояние и това, кои състояния са запълнени, той може да ни каже каква е вероятността за намиране на електрона на някакво място в молекулата. Тези места, където пребиваването на електрон е по-вероятно, встъпват в игра при такива химически заместявания, които изискват електронът да обслужва и друга група атоми. Другите места на молекулата участвуват в такива заместявания, при които молекулата има тенденция да предаде на системата още един електрон.

Подобни идеи могат да ни помогнат да добием правилна представа дори за такива сложни молекули, като хлорофила, един от вариантите на който е показан на фиг. 13.12. Обърнете внимание, че двойните и единичните връзки образуват дълъг затворен пръстен с двадесет интервала.

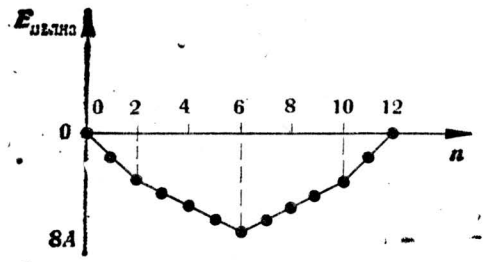
Добавъчните електрони на двойните връзки могат да се движат по този пръстен. С помощта на метода на независимите частици може да се получи цялата съвкупност от енергетични нива. При преходи между тези нива възникват силни линии на поглъщане, които лежат във видимата част на спектъра и предават на тази молекула наситен цвят. И други сложни молекули, като ксантофила, от който листата получават червена окраска, може да се изучат съвсем по същия начин.



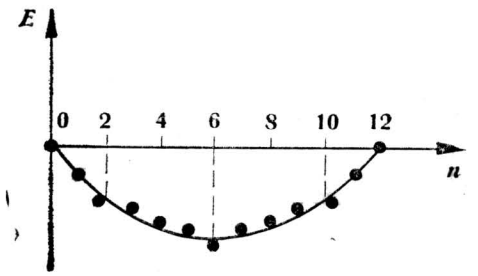
Фиг. 13.12. Молекул а на хлорофила

В органичната химия при работа с теория от подобен род се използува още една идея. Тя може би е най-сполучливата от всички (или поне в определен смисъл е най-точна). Тя отговаря на такъв въпрос: в какви случаи се получава особено здрава химична връзка? Отговорът е много интересен. Да вземем най-напред за пример бензола и да представим редицата събития, които ще произлязат, ако тръгнем от шесткратно йонизирана молекула и започнем да добавяме нови и нови електрони. Тогава трябва да говорим за различни йони на бензола — отрицателни и положителни. Да представим графически енергията на йона (или на неутралната молекула) като функция от броя на електроните. Ако

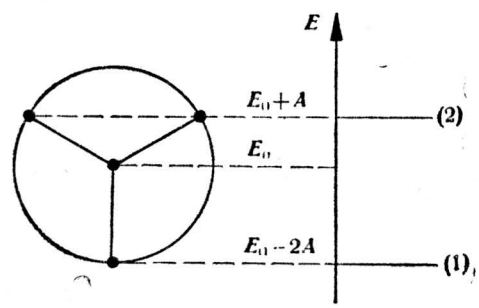
[1]Отношението между страните на правоъгълник, който може да се раздели на квадрат и на правоъгълник, подобен на изходния.



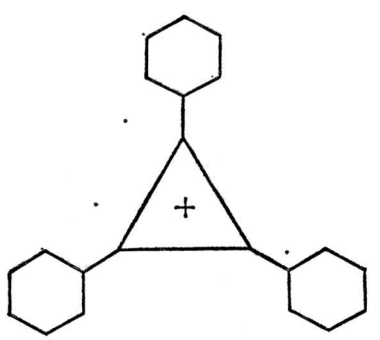
Фиг. 13.13. Сума на всичките електронни енергии, когато долните състояния на фиг. 13.8 са допълнени с n електрона (прието е, че $E_0=0$)



Фиг. 13.14. Точките от фиг. 13.13 и плавна крива. Молекулите с $n=2$, 6, 10 са по-устойчиви от останалите



Фиг. 13.15. Енергетична диаграма за пръстен от три атома



Фиг. 13.16. Катион на трифенилциклопропанила

приемем $E_0=0$ (ние не знаем на колко е равно E_0), тогава ще получим крива, показана на фиг. 13.13. За първите два електрона наклонът на функцията е постоянен — това е права линия. След това за всяка поредна група електрони той нараства, изменяйки се скокообразно от една група към друга. Наклонът се изменя тогава, когато завършва запълването на системата от нива с една и съща енергия и следващият електрон трябва да извърши преход към поредната по-висока система нива.

В действителност истинската енергия на йона на бензола съвсем не прилича на тази, представена на фиг. 13.13, поради взаимодействието на електроните и поради електростатичните енергии, които ние пренебрегнахме. Тези поправки обаче се менят доста плавно с n. Дори когато всичко това се вземе под внимание, върху окончателната крива на енергията все едно биха останали изгъвания при онези n, при които именно се запълват отделните системи енергетични нива.

Да разгледаме сега много гладка крива, върху която средно попадат всички точки (фиг. 13.14). Може да се каже, че точките над кривата имат енергия, „по-висока от нормалната". И в общия случай следва да се очаква, че за конфигурация с енергия, „по-ниска от нормалната", средната устойчивост ще се окаже повишена. Обърнете внимание, че конфигурациите, които са значително по-ниско от кривата, винаги се оказват в края на един от праволинейните участъци, а именно там, където електроните са точно толкова, колкото трябва за запълване на „енергетичната обвивка", както я наричат. Това е много точно предсказание на теорията. *Молекулите и йоните са особено устойчиви (в сравнение с останалите подобни конфигурации), когато наличните електрони в тях са точно толкова, че да запълват енергетичната обвивка.*

Тази теория е обяснила и предсказала някои твърде необикновени химически факти. Ето един много прост пример. Да вземем пръстен от три атома. Почти е невъзможно да се повярва, че химикът може да образува от три атома пръстен и да го направи устойчив. Но това е било направено. Енергетичният кръг за трите електрона е показан на фиг. 13.15. Ако в долното състояние се поместят два електрона, само два от трите електрона влизат в работа. Третият електрон трябва да бъде поставен на по-високо ниво. Оттук следва, че молекулата няма да бъде твърде устойчива. Ето защо двуелектронната структура трябва да бъде устойчива. И наистина оказва се, че е много трудно да се създаде неутрална молекула на трифинилциклопропанила, но затова е сравнително лесно да се формира положителен йон, показан на фиг. 13.16. Наистина никога не е лесно да се създаде пръстен от три атома, тъй като в случая, когато връзките в органичната молекула образуват равностранен триъгълник, винаги се появяват големи напрежения. За да се получи устойчиво съединение, такава структура трябва някак да се стабилизира. Оказва се, че ако по ъглите се поставят три бензолни пръстена, може да се създаде положителен йон. (А защо трябва да се добавят бензолни пръстени, не е ясно.)

По същия начин може да се анализира и петоъгълен пръстен Ако вие начертаете енергетичната диаграма, можете да се убедите (качествено), че шестелектронната структура в случая трябва да бъде най-устойчива, така че такава молекула ще бъде най-устойчива във вид на отрицателен йон. И наистина пръстен от пет атома е много добре известен, лесно се формира и има поведение винаги на отрицателен йон. По същия начин вие лесно можете да се убедите, че пръстени от 4 и 8 атома не са интересни, а пръстени от 14 и 10 (както и пръстен от 6) атома представляват особено устойчиви форми на неутрални обекти.

13-6. Други приложения на приближението

Има два други подобни случая, на които ние ще се спрем за малко. Говорейки за строежа на атома, може да кажем, че електроните запълват последователно отделните слоеве. Шрьодингеровата теория за движението на електрона може лесно да се разработи само за случая на *отделен* електрон, който се движи в централно поле — поле, зависещо само от разстоянието до една точка. Но как да се разбере тогава какво става в един атом, който има 22 електрона?! Един от пътищата е да се използува приближението на независимите частици. Най-напред вие пресмятате всичко, което става при наличието на един електрон. Получавате някакъв брой енергетични нива. Поставяте електрона в най-ниското енергетично състояние. В един груб модел вие продължавате да игнорирате взаимодействието между електроните и продължавате да запълвате последователно слоевете, но още по-добри отговори ще се получат, ако се вземе под внимание (макар и приблизително) влиянието на електричния заряд на електрона. Добавяйки електрон, всеки път пресмятайте амплитудата за това той да бъде намерен на различни места и след това с нейна помощ приблизително пресмятайте вида на сферично-симетричното разпределение на заряда. Използувайте полето на заряда с такова разпределение (заедно с полето на положителното ядро и всичките преходни електрони) за пресмятане на състоянията, които са достъпни за следващия електрон. По този начин вие можете да получите напълно разумни оценки за енергиите на неутралния атом, и на различните йонизирани състояния. Вие ще видите, че и тук има енергетични слоеве, така както за електроните в една пръстеновидна молекула. При не съвсем запълнен слой атомът понякога по-охотно присъединява към себе си един или няколко електрона, а понякога по-охотно ги губи, за да дойде в устойчивото състояние, когато слоят е запълнен.

Тази теория обяснява механизма, който лежи в основата на най-фундаменталните химически свойства, проявяващи се в периодичната таблица на елементите. Инертните газове са онези елементи, при които именно е завършено запълването на даден слой и те много трудно могат да бъдат заставени да участвуват в някаква реакция. (Всъщност някои от тях, разбира се, реагират например с флуора или с кислорода, но в получените съединения връзката е много слаба; т.нар. инертни газове са инертни само отчасти. Атом, който има един електрон повече или един електрон по-малко от съответния инертен газ, лесно губи или присъединява един електрон, като се оказва в особено устойчиви (нискоенергетични) условия, каквито възникват тогава, когато даденият слой е запълнен докрай; такива са атомите на твърде активните химически елементи с валентност $+1$ и -1.

В ядрената физика може да се срещне друг подобен случай. В атомното ядро протонът и неутронът взаимодействуват много силно помежду си. Но и при това положение моделът на независимите частици е отново много полезен за анализ на структурата на ядрото. Най-напред е било открито експериментално, че ядрата са особено устойчиви, ако те съдържат определен брой неутрони, а именно 2, 8, 20, 28, 50, 82. Ядрата, съдържащи такова количество протони, са също особено устойчиви. Тъй като първоначално тези числа не са били обяснени, нарекли ги „магични числа“ на ядрената физика. Добре известно е, че неутроните силно взаимодействуват помежду си; затова хората са били силно удивени, когато се изяснило, че моделът на независимите частици предсказва слоест строеж на ядрото, като няколко от първите магични числа възникват съвсем естествено. В този модел се предполага, че всеки нуклон (протон или неутрон) се движи в централно потенциално поле, което се създава от средното влияние на всички останали нуклони. Обаче моделът не е могъл да предскаже вярно другите магически числа. Но след това Мария Майер и независимо Йенсен със свои сътрудници открили, че приемайки мо-

дела на независимите частици и добавяйки само поправка за сметка на т.нар.„спин-орбитално взаимодействие“, в така усъвършенству вания модел може да се получат всички магични числа. (Спин-орбиталното взаимодействие води към това, че енергията на нуклона се оказва по-ниска, ако неговият спин има същата посока, както орбиталния му момент на количеството на движение в ядрото.) Теорията дава дори повече — построената по този начин картина на т. нар. „слоеста структура“ на ядрото позволява да се предсказват някои характеристики на ядрата и на ядрените реакции.

Приближението на независимите частици се оказва полезно за широк кръг явления — от физиката на твърдото тяло до химията, от биологията до ядрената физика. Това приближение често пъти е много грубо, но то е в състояние да ни помогне да разберем защо възникват слоеве. Но тъй като то не взема под внимание цялата сложност на взаимодействията между индивидуалните частици, нас не трябва да ни удивлява фактът, че често пъти това приближение не може правилно да предскаже много важни детайли.

14

Зависимост на амплитудата от мястото

14-1. Изменение на амплитудата по дължината на права

Сега ще изясним как се изменят в пространството амплитудите на вероятността в квантовата механика. В някои от предходните глави у вас може да е възникнало смътното чувство, че ние премълчаваме нещо. Например, когато говорихме за молекулата на амоняка, ние решихме да я описваме чрез две базисни състояния. Като едно такова състояние ние избрахме случая, когато атомът на азота се намира „над“ равнината на трите водородни атома, а в качеството на друго базисно състояние избрахме такива условия, когато атомът на азота стои „под“ равнината на трите водородни атома. Защо избрахме именно тази двойка състояния? Защо не приехме, че атомът на азота може да се окаже на разстояние 2Å от равнината на трите водородни атома или на разстояние 3Å, а може и на 4Å? Нали азотният атом може да заема различни положения? Или когато ставаше дума за молекулярния йон на водорода, в който има електрон, разпределен между двата протона, ние също си представяхме две състояния: едното, когато електронът се намира в съседство с протона №1, и другото, когато той пребивава в околността на протон №2. Ясно е, че при това ние изпускаме много подробности. Електронът всъщност не се намира до самия протон №2, а само в неговата околност. Той може да се окаже и някъде по-високо от протона, и някъде по-ниско или някъде отляво, или отдясно.

Ние умишлено избягвахме уточняването на тези детайли. Ние заявявахме, че се интересуваме само от определени страни на проблемата, и си представяхме, че щом електронът се намира близо до протон №1, то той заема някакво добре определено положение.

Всъщност при тези условия вероятността да се намери някъде електронът има някакво определено разпределение в пространството около протона. Но нас такива детайли не ни засягаха.

Работата може да бъде представена и иначе. Когато разглеждахме молекулярния йон на водорода, ние избрахме приблизителен подход, описвайки положението на нещата на един език само с две базисни състояния. В действителност такива състояния има много. Електронът може да попадне около протона в своето най-ниско или основно състояние, но има и още много възбудени състояния. Във всяко от тях електронът някак си особено е разпределен около протона. Ние игнорирахме тези възбудени състояния, като заявявахме, че се интересуваме само от състоянията с най-ниска енергия. Но точно тези възбудени състояния и водят до това, че са възможни различни разпределения на електрона около протона. Ако ние искаме детайлно да опишем молекулярния йон на водорода, следва да вземем под внимание и тези други базисни състояния. Това може да се направи по много начини и един от тях е по-детайлното разглеждане на състоянията, когато описанието на електрона в пространството е по-точно.

Ние вече сме достатъчно добре подготвени, за да се заемем с една по-трудоемна процедура, която ще ни позволи по-обстойно да говорим за местоположението на електрона, задавайки амплитудата на вероятността за това той да бъде открит на кое да е място в някаква дадена ситуация. Тази по-пълна теория ще ни позволи да подкрепим онези приближения, които използувахме по-рано. Нашите предишни уравнения в известен смисъл може да бъдат изведени като приближение към по-пълната теория.

14-1. Изменение на амплитудата по дължината на права

14-2. Вълнова функция

14-3. Състояние с определен импулс

14-4. Нормировка на състоянията с определена координата x.

14-5. Уравнение на Шрьодингер

14-6. Квантуване на енергетичните нива

Вас може да ви удиви това, че ние не започнахме направо с по-пълна теория, в която приближенията може да се направят успоредно с нейното развитие. Но ние смятаме, че тръгвайки от приближението с две състояния и постепенно приближавайки се до по-пълна теория, за вас ще е по-лесно да разберете целия механизъм на квантовата механика. Нашият подход вероятно е противоположен на онова, което вие ще намерите в много книги.

Когато се заемем с темата на тази глава, вие ще забележите, че ще нарушим правилото, което в миналото неизменно сме следвали. Каквато и тема да сме засягали досега, ние винаги сме се опитвали да ви представим повече или по-малко пълно физическата същност на въпроса, посочвайки колкото е възможно по-пълно накъде водят тези идеи. Нашият стремеж винаги е бил наред с описанието на общите следствия на теорията да представим и някои характерни детайли, за да ви е ясно къде води тази теория. А сега ни се налага да нарушим това правило. Ние ще разкажем за амплитудите на вероятността за пребиваване на електрона някъде в пространството и ще разгледаме диференциалните уравнения, които те удовлетворяват. Но ние няма да имаме време да се задълбочим и да обсъдим много очевидни изводи, следващи от теорията. Нещо повече, на нас дори не ще ни се удаде да свържем тази теория с някои приблизителни формулировки, към които ние прибягвахме по-рано, например когато изучавахме молекулата на водорода или молекулата на амоняка. Този път ще се наложи работата да бъде захвърлена по средата, без да се довърши. Нашият курс се приближава към своя край и щем-нещем, ще се наложи да се задоволим само с едно въвеждане в областта на общите представи. Ние ще посочим връзката с онова, за което се говори по-рано, а освен това и някои други подходи към задачите на квантовата механика. Надяваме се, че тези представи ще ви стигнат, за да може след това сами да се заемете и вече от книгите да узнаете за много изводи от приведените тук уравнения. Все пак трябва да се остави нещо и за бъдещето.

Да си спомним още един път за това, как електронът може да се придвижва по дължината на една верига от атоми. Когато електронът може да прескача от един атом към друг с някаква амплитуда, има състояния с определена енергия, в които амплитудата на вероятността за намиране на електрона на дадено място се разпределя по дължината на решетката във вид на бягаща вълна. За дългите вълни (малки стойности на вълновото число k) енергията на състоянието е пропорционална на квадрата на вълновото число. За кристална решетка с константа b, в която амплитудата за това, че електронът прескача от един атом към съседния за една секунда, е равна на $iA/\hbar$, енергията на състоянието е свързана с k (при малки kb) с формулата

$$E = Ak^2b^2 \tag{14.1}$$

(вж. гл.11, §1).

Ние видяхме също тъй, че групи от такива вълни с близки енергии образуват вълнов пакет, който има поведение на класическа частица с маса

$$m_{\text{еф}} = \frac{\hbar^2}{2Ab^2}. \tag{14.2}$$

Щом вълните на амплитудата на вероятността в кристала имат поведение на частица, естествено е да се очаква, че общото квантовомеханично описание на частиците ще проявява също такова вълново поведение, каквото ние наблюдаваме в решетката. Да предположим, че сме взели едномерна решетка, и да си въобразим, че константата на решетката b става все по-малка и по-малка. В граница би се получило, че електронът може да се окаже във всяка точка на атомната верига. На нас би ни се наложило да преминем към непрекъснато разпределение на амплитудата на вероятността. Би се появила амплитуда, затова електронът да се окаже в коя да е точка от атомната верига. Такъв би бил един от пътищата за описание на движението на електроните във

вакуум. С други думи, ако ние си представим, че цялото пространство може да се запълни с безкраен брой много близко разположени номерирани точки и съумеем да изведем уравнения, свързващи амплитудата в една точка с амплитудите в съседните точки, то ние ще получим квантовомеханичните закони за движение на електрона в пространството.

Ще започнем с напомняне на някои общи принципи на квантовата механика. Нека имаме една частица (електрон), която може да съществува в различни състояния в една квантовомеханична система. Произволните зададени условия, в които може да бъде открит електронът, ние наричаме „състояния“ и ще ги отбелязваме чрез един вектор на състоянието, например $|\varphi>$. В някакви други условия и белегът ще бъде друг, да речем вектор на състоянието $|\psi>$. След това ние въвеждаме идеята за базисни състояния. Ние казваме, че съществува съвкупност от състояния $|1>$, $|2>$, $|3>$, $|4>$ и т. н., която има следните свойства: Първо, всички тези състояния са напълно различни—ще казваме, че те са ортогонални помежу си. Под това разбираме, че за всяка двойка базисни състояния $|i>$ и $|j>$ е равна на нула амплитудата $<i|j>$, затова електронът, който е в състояние $|j>$, да се окаже също и в състояние $|i>$, ако, разбира се, $|i>$ и $|j>$ не означават едно и също състояние. Всичко това символично се представя така:

$$<i|j>=\delta_{ij}. \tag{14.3}$$

Спомнете си, че $\delta_{ij}=0$, ако i и j са различни, и $\delta_{ij}=1$, ако i и j са еднакви.

По-нататък базисните състояния $|i>$ трябва да образуват пълна съвкупност, така че произволното състояние да може да бъде изразено на техен език. С други думи, всяко състояние $|\varphi>$ може да бъде описано напълно, като се зададат всички амплитуди $<i|\varphi>$ за това, че частицата в състояние $|\varphi>$ се намира също в състояние $|i>$. Векторът на състоянието $|\varphi>$ се представя като сума от базисните състояния всяко едно, умножено с коефициент, равен на амплитудата за това, че състоянието $|\varphi>$ се намира също в състоянието $|i>$:

$$|\varphi>=\sum_i |i><i|\varphi>. \tag{14.4}$$

На края, ако разгледаме две произволни състояния $|\varphi>$ и $|\psi>$, амплитудата за това, че състоянието $|\psi>$ ще се окаже също в състоянието $|\psi>$, може да се намери, като най-напред състоянието $|\psi>$ се проектира върху базисните състояния, а след това всяко от базисните състояния се проектира върху състоянието $|\varphi>$. Това се записва така:

$$<\varphi|\psi>=\sum_i <\varphi|i><i|\psi>. \tag{14.5}$$

Сумирането естествено се провежда по цялата съвкупност от базисни състояния.

В гл. 11, когато разглеждахме поведението на електрона, поместен в една линейна верига от атоми, ние избирахме съвкупност от базисни състояния, в които електронът е разположен близо до един или друг атом от веригата. Базисното състояние $|n>$ представляваше електрон, локализиран (разположен) около атом с номер n. (Разбира се, не е важно как са означени базисните състояния — с $|n>$ или $|i>$.) Малко по-късно ние установихме, че е по-удобно базисните състояния да се бележат с координатата на атома, а не с номера на атома във веригата. Състоянието $|x_n>$ е просто друг начин за записване на състоянието $|n>$. Тогава, следвайки общото правило, произволно състояние $|\psi>$ може да се опише, като се зададе това, че електронът в състояние $|\psi>$ се намира също в едно от състоянията $|x_n>$. За удобство ние решихме да означаваме тези амплитуди със символа

$$C_n = \langle x_n \mid \psi \rangle. \qquad (14.6)$$

Тъй като базисните състояния са свързани с местоположението на електрона в атомната верига, амплитудата C_n може да се разглежда като функция на координатата x и да се пише във вида $C(x_n)$. Амплитудите $C(x_n)$ в общия случай ще се изменят с времето и затова са също функции на t, но ние няма да отбелязваме тази зависимост явно.

Освен това в 11 гл. ние предположихме, че амплитудите $C(x_n)$ трябва да се изменят с времето така, както е положено по уравнението на Хамилтон (11.3). В нашите нови означения това уравнение има вид

$$i\hbar \frac{\partial C(x_n)}{\partial t} = E_0 C(x_n) - AC(x_n+b) - AC(x_n-b). \qquad (14.7)$$

Двете последни събираеми в дясната част представляват такъв процес, в който електронът, намиращ се около $(n+1)$-я атом или около $(n-1)$-я атом, преминава около атома с номер n.

Ние установихме, че уравнението (14.7) има решения, отговарящи на състояния с определена енергия. Тези решения записахме във вид

$$C(x_n) = e^{iEt/\hbar}\ e^{ikx_n}. \qquad (14.8)$$

За състоянията с ниска енергия дължината на вълната е голяма (k малко) и енергията е свързана с k чрез формулата

$$E = (E_0 - 2A) + Ak^2b^2, \qquad (14.9)$$

или ако нулата на енергетичната скала се избере така, че да имаме $E_0 - 2A = 0$, енергията се дава от формулата (14.1).

Да видим какво би станало, ако оставим разстоянието b между атомите на решетката да клони към нула, запазвайки вълновото число постоянно. Ако при това нищо друго не би се случило, последният член в (14.9) просто би се обърнал в нула и след това не би останала никаква физика. Но да предположим, че A и b се изменят заедно, така че при клоненето на b към нула произведението Ab^2 се поддържа константно[1]: с помощта на (14.2) ние можем да запишем Ab^2 във вид на константата $\hbar^2/2m_{\text{еф}}$. При това (14.9) няма да се измени, но какво ще стане с диференциалното уравнение (14.7)?

Да препишем (14.7) най-напред така:

$$i\hbar \frac{\partial C(x_n)}{\partial t} = (E_0 - 2A)\, C(x_n)$$

$$+ A[2\, C(x_n) - C(x_n+b) - C(x_n-b)]. \qquad (14.10)$$

При нашия избор на E_0 първото събираемо отпада. По-нататък да си представим непрекъснатата функция $C(x)$, която плавно приема стойностите на $C(x_n)$ в точките x_n. Когато разстоянието b се стреми към нула, точките x_n се приближават една до друга все повече и [ако $C(x)$ се изменя достатъчно плавно] величината в скобките е просто пропорционална на втората производна на $C(x)$. Може да се напише равенството:

$$2C(x) - C(x+b) - C(x-b) \approx -b^2 \frac{\partial^2 C(x)}{\partial x^2}, \qquad (14.11)$$

в което лесно се убеждаваме, като разложим в ред на Тейлър всеки член. Тогава в граничния случай, когато b се стреми към нула, а b^2A се поддържа равно на $\hbar^2/2m_{\text{еф}}$, уравнението (14.7) приема вида

$$i\hbar \frac{\partial C(x)}{\partial t} \approx -\frac{\hbar^2}{2m_{\text{еф}}} \frac{\partial^2 C(x)}{\partial x^2}. \qquad (14.12)$$

---

[1] Представете си, че с приближаването на точките x_n амплитудата A за преминаване от $x_{n\pm1}$ в x_n нараства.

Пред нас е уравнение, което показва, че скоростта на изменението на $C(x)$—амплитудата за това електронът да бъде намерен в точка x—зависи от амплитудата електронът да бъде намерен в близко лежащите точки, така че тази скорост е пропорционална на втората производна на амплитудата по координатата.

Правилното квантовомеханично уравнение на движението на електрона във вакуум е било открито за първи път от Шрьодингер. При движение по права това уравнение съвпада с уравнението (14.12), необходимо е само $m_{сф}$ да се замени с m—масата на електрона във вакуум. При движение по права линия уравнението на Шрьодингер има вида

$$i\hbar \frac{\partial C(x)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m^2} \frac{\partial^2 C(x)}{\partial x^2}. \qquad (14.13)$$

Ние съвсем не искаме да считате, че сме извели уравнението на Шрьодингер; тук само показваме един от начините за неговото осмисляне. Когато Шрьодингер написал това уравнение за първи път, той привел някакъв извод, който се опирал на евристични доводи и блестящи интуитивни догадки. Някои от неговите доводи били дори неверни, но това нямало значение, важно е това, че окончателното уравнение дава правилно описание на природата. И целта на нашето обсъждане се състои просто в това да ви покажем, че правилното квантовомеханично уравнение (14.13) има съвсем същата форма, която се получава в граничния случай за електрон, движещ се по дължината на верижка от атоми. Това означава, че може да се счита, че диференциалното уравнение (14.13) описва дифузията на амплитудата на вероятността от една точка към друга по дължината на права. С други думи, ако електронът има някаква амплитуда за това да бъде в една точка, малко по-късно за него се появява амплитудата той да бъде и в близко лежащите точки. Уравнението наистина напомня уравнението на дифузията, което ние използувахме в началото на курса. Но има и една важна разлика: имагинерният коефициент пред производната по времето води към поведение, коренно различно от това при обикновената дифузия (например от дифузия на газ, разпространяващ се по дълга тръба). Обикновената дифузия води към реални експоненциални решения, а решенията на (14.13) са комплексни вълни.

14-2. Вълнова функция

За да се получи някаква представа за това, как сега ще изглеждат нещата, да се върнем към самото начало и да изучим проблемата за описание на движението на електрона по права, без да разглеждаме състояния, свързани с атомната решетка. Ние искаме да се върнем към самото начало и да видим какви представи трябва да използуваме, за да опишем движението на една свободна частица в пространството. Щом като ние се интересуваме от поведението на частицата по дължината на континуум от точки, ще се наложи да имаме работа с безкрайно множество възможни състояния и както вие ще видите, идеите, които бяха развити за краен брой състояния, ще трябва да претърпят някои технически изменения.

Започваме с това, че с вектора на състоянието $|x>$ означаваме състоянието, в което частицата е разположена точно в точка с координата x. За всяка стойност на x по дължината на правата—за 1,73, за 9,67 за 10,00 и т. н. — има съответното състояние. Избираме тези състояния за базисни. Ако това се направи за всички точки x от правата, ще се получи пълна съвкупност от, състояния за случая на едномерно движение. Сега да предположим, че има друг тип състояния, да речем $|\phi>$, в които електронът е разпределен по някакъв начин по дължината на правата. Един от начините да се опише това състояние е като се зададат амплитудите за това, че електронът ще бъде намерен също във всяко едно от безизните състояния $|x>$. Трябва да се зададе безкрай-

на съвкупност от амплитуди, по една за всяко x. Да ги запишем във вида $<x \mid \psi>$. Всяка от тези амплитуди е комплексно число и понеже за всяка стойност на x съществува таково число, амплитудата $<x \mid \psi>$ е в действителност проста функция. Да я запишем също тъй във вида

$$C(x) \equiv <x \mid \psi>. \tag{14.14}$$

Ние разглеждахме вече такива амплитуди, които се изменят непрекъснато с изменение на координатата, когато в гл. 5 говорихме за измененията на амплитудите с времето. Ние показахме там например, че би трябвало да се очаква една частица с определен импулс да има особен тип изменение на своята амплитуда в пространството. Ако частицата има определен импулс p и съответно определена енергия E, амплитудата за това тя да бъде намерена в произволна точка x е

$$<x \mid \psi> = C(x) \sim e^{+ipx/\hbar}. \tag{14.15}$$

Това уравнение изразява важен общ принцип на квантовата механика, който свързва базисните състояния, съответствуващи на различни положения в пространството, с друга система базисни състояния—всички състояния с определен импулс. В някои задачи състоянията с определен импулс са по-удобни от състоянията с определена координата x. Разбира се, всяка друга система базисни състояния също тъй може да се приеме при описание на една квантовомеханична ситуация. Ние ще се върнем по-късно към въпроса за връзката между тях. Засега ще се придържаме към описанието на езика на състоянията $\mid x>$.

Преди да продължим, ще направим малка промяна в означенията, която надяваме се, няма да ви смути особено. Формата на функцията $C(x)$, определена с уравнението (14.14), естествено ще зависи от разглежданото състояние $\mid \psi>$. Това трябва по някакъв начин да се отбележи. Ние можем например да посочим за коя функция $C(x)$ става дума, като поставим долен индекс, да речем $C_\psi(x)$. Въпреки че това означение е напълно подходящо, то все пак е малко неудобно и в повечето книги не се среща. Обикновено буквата C просто се изпуска, а се използува само символът ψ за определяне на функцията

$$\psi(x) \equiv C_\psi(x) = <x|\psi>. \tag{14.16}$$

Тъй като това означение е прието в цял свят, добре би било и вие да свикнете с него и да не се плашите, когато го срещнете някъде. Трябва само да се помни, че ψ ще бъде използувано за две различни цели. В (14.14) ψ означава белег, с помощта на който ние отбелязваме дадено физическо състояние на електрона. А в лявата част на (14.16) символът ψ се използува за определяне на математическата функция на x, равна на амплитудата, която се свързва с всяка точка x от правата. Надяваме се, че това съвсем няма да ви смущава, когато вие привикнете със самата идея. Впрочем функцията $\psi(x)$ обикновено се нарича „вълнова функция“, понеже тя много често има форма на комплексна вълна на своите аргументи.

Тъй като ние определихме $\psi(x)$ като амплитуда за това електронът в състояние ψ да бъде намерен в точка x, ние бихме могли да поискаме да интерпретираме квадрата на абсолютната стойност на ψ като вероятност за намиране на електрона в точка x. За съжаление вероятността за намиране на електрона в коя да е точно определена точка е равна на нула. Електронът в общия случай се размазва върху някаква част от правата и тъй като всяка такава част съдържа безкрайно много точки, то вероятността той да се окаже в коя да е от тях не може да бъде крайно число. Вероятността за намиране на електрона можем да опишем само с езика на *вероятностното разпределение*[1], което ни дава относителната вероятност за намиране на електрона в различни неточно посочени места върху правата. Нека Вер. $(x, \Delta x)$

[1] За вероятностно разпределение ставаше дума в гл. 6, § 4 (том I).

да означава вероятността за намиране на електрона върху един малък интервал Δx около точката x. Ако ние във всяка физическа ситуация използуваме достатъчно дребен мащаб, вероятността ще се мени плавно от точка към точка и вероятността за откриване на електрона в произволен краен малък интервал Δx от правата ще бъде пропорционална на Δx. И нашите определения може да бъдат изменени така, че това да бъде взето под внимание.

Можем да си мислим, че амплитудата $<x \mid \psi>$ представлява един вид „амплитудна плътност" за всички базисни състояния $|x>$ в една малка област на x. Тъй като вероятността за намиране на електрона в малкия интервал Δx около точката x трябва да бъде пропорционална на дължината на интервала Δx, ние избираме такова определение на $<x \mid \psi>$, че да има място следното условие

$$\text{Вер. } (x, \Delta x) = \mid <x \mid \psi> \mid^2 \Delta x.$$

По такъв начин амплитудата $<x \mid \psi>$ е пропорционална на амплитудата за това, че електронът в състояние ψ ще бъде намерен в базисното състояние x, а коефициентът на пропорционалност е избран така, че квадратът от абсолютната стойност на $<x \mid \psi>$ да дава *плътността на вероятността* за намиране на електрона в произволен малък интервал. Ние можем да пишем и така

$$\text{Вер. } (x, \Delta x) = \mid \psi(x) \mid^2 \Delta x. \tag{14.17}$$

Сега трябва да изменим някои наши предишни уравнения, за да ги съгласуваме с това ново определение на амплитудата на вероятността. Нека имаме електрон в състояние $|\psi>$, а искаме да знаем амплитудата за това, че той ще бъде открит в друго състояние $|\varphi>$, което може да съответствува на други условия за разпределение на електрона. Когато ставаше дума за крайна система дискретни състояния, ние използувахме уравнението (14.5). Преди изменянето на нашето определение на амплитудите ние пишехме:

$$<\varphi \mid \psi> = \sum_{\substack{\text{Всички} \\ x}} <\varphi \mid x><x \mid \psi>. \tag{14.18}$$

А сега, ако тези две амплитуди са нормирани така, както е описано по-горе, сумата по всички състояния от един тесен интервал около x е еквивалентна на умножение с Δx, а сумата по всички стойности на x просто ще се превърне в интеграл. При нашите изменени определения правилната формула ще бъде такава:

$$<\varphi \mid \psi> = \int_{\substack{\text{Всички} \\ x}} <\varphi \mid x><x \mid \psi> dx. \tag{14.19}$$

Амплитудата $<x \mid \psi>$ е това, което ние сега наричаме $\psi(x)$; точно така и амплитудата $<x \mid \varphi>$ ще означим с $\varphi(x)$. Като си спомним, че $<\varphi \mid x>$ е комплексно спрегнато и на $<x \mid \varphi>$, (14.18) може да се препише във вида

$$<\varphi \mid \psi> = \int \varphi^*(x)\, \psi(x)\ dx. \tag{14.20}$$

При тези нови означения всички предишни формули остават същите, ако навсякъде знакът за сумиране се замени с интегриране по x.

Към всичко, което беше казано, трябва да се направи една уговорка. Всяка подходяща система базисни състояния трябва да бъде пълна, ако искаме тя да отразява всичко, което се случва. За едномерното движение на електрона в действителност е недостатъчно да се посочат само базисните състояния $|x>$, тъй

като във всяко от тези състояния спинът на електрона може да бъде насочен нагоре или надолу. Един от начините за получаване на пълна система е да вземем две съвкупности от състояния по x: едната за спин насочен нагоре, другата за спин, насочен надолу. Ние, впрочем засега няма да навлизаме в такива подробности.

14-3. Състояния с определен импулс

Нека имаме електрон в състояние $|\psi\rangle$, който се описва от амплитудата на вероятността $\langle x|\psi\rangle=\psi(x)$. Ние знаем, че $\psi(x)$ представлява състояние, в което електронът е размазан по дължината на правата съгласно някакъв закон, така че вероятността той да бъде намерен в малкия интервал dx около точката x просто е равна на

$$\text{Вер. } (x, dx)= |\psi(x)|^2\, dx.$$

Какво може да се каже за импулса на този електрон? Може да се запитаме каква е вероятността импулсът на този електрон да е равен на p. Ще започнем с пресмятане на амплитудата за това, че състоянието $|\psi\rangle$ присъствува в друго състояние, а именно $|\text{имп. } p\rangle$, което ние определяме като състояние с определен импулс p. Тази амплитуда може да се намери, като се приложи нашето основно уравнение (14.20) за разлагане на амплитудата. В термините на състоянията $|\text{имп. } p\rangle$ имаме

$$\langle\text{имп. } p|\psi\rangle=\int_{x=-\infty}^{+\infty}\langle\text{имп. } p\rangle|x\rangle\langle x|\psi\rangle\, dx. \qquad (14.21)$$

А вероятността за това, че електронът ще има импулс p, ще се изрази чрез квадрата на абсолютната стойност на тази амплитуда. Но отново възниква същият въпрос относно нормировката. Въобще може да се говори само за вероятността електронът да има импулс в тесния интервал dp около стойността p. Вероятността за това, че импулсът е равен точно на p, е равна на нула (с изключение на случая, когато състоянието $|\psi\rangle$ се окаже състояние с определен импулс). Само вероятността електронът да има импулс в интервала dp около стойността p може да се окаже крайна. Нормировката може да бъде различна. Ние ще изберем такъв начин за нормиране, който ни се струва особено удобен, макар че на вас сега още това може да не ви изглежда така.

Избираме такава нормировка, че вероятността да е свързана с амплитудата посредством равенството

$$\text{Вер. } (p, dp)= |\langle\text{имп. } p|\psi\rangle|^2\frac{dp}{2\pi\hbar}. \qquad (14.22)$$

Това определение ни дава нормировката на амплитудата $\langle\text{имп. } p|x\rangle$. Амплитудата $\langle\text{имп. } p|x\rangle$ естествено е комплексно спрегната с амплитудата $\langle x|\text{имп. } p\rangle$, а последната се дава от уравнението (14.15). При нашата нормировка се оказва, че коефициентът на пропорционалност пред експонентата е равен точно на единица, т. е.

$$\langle\text{имп. } p|x\rangle=\langle x|\text{имп. } p\rangle^*=e^{-ipx/\hbar}. \qquad (14.23$$

Тогава (14.21) се превръща в

$$\langle\text{имп. } p|\psi\rangle=\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-ipx/\hbar}\langle x|\psi\rangle\, dx. \qquad (14.24)$$

Заедно с (14.22) това уравнение позволява да се намери разпределението по импулси за всяко състояние $|\psi\rangle$.

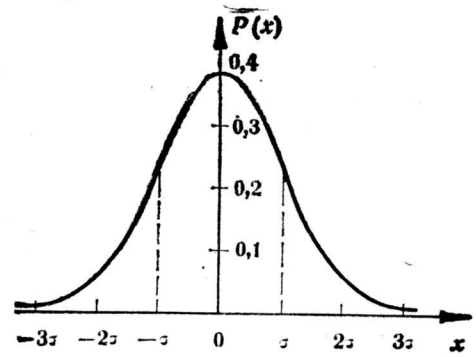
Ще разгледаме един частен пример, а именно, когато електронът е разположен в някаква област около $x=0$. Нека вземем вълновата функция във вида

$$\psi(x) = Ke^{-x^2/4\sigma^2}. \qquad (14.25)$$

Разпределението на вероятността да имаме една или друга стойност на x за такава вълнова функция се дава от нейния квадрат

$$\text{Вер.}\ (x,\ dx) = P(x)\,dx = K^2 e^{-x^2/2\sigma^2}\,dx. \qquad (14.26)$$

Функцията на плътността на вероятността $P(x)$ е кривата на Гаус, показана на фиг. 14.1. Голяма част от вероятността е съсредоточена между $x = +\sigma$ и $x = -\sigma$. Ние казваме, че „полуширината" на кривата е σ. (По-точно σ е равно на средната квадратична координата x, ако разсейването на координатите съответствува на това разпределение.) Коефициентът K би следвало да се избере така, че плътността на вероятността $P(x)$ не просто да е *пропорционална* на вероятността (на единица дължина от оста X) за намиране на електрона, но да има такъв мащаб, че $P(x)\,\Delta x$ да е *равно* на вероятността за намиране на електрона на интервала Δx около x. Коефициентът K, при който така ще се и получи, може да се намери от изискването $\int_{-\infty}^{+\infty} P(x)\,dx = 1$, тъй като вероятността за това, електронът да се намери където и да било е равна на единица. Ние намираме, че $K = (2\pi\sigma^2)^{-1/4}$ [1].



Фиг. 14.1. Плътност на вероятността за вълновата функция (14.24)

Сега да намерим разпределението по импулса. Нека $\varphi(p)$ е амплитудата за това, че импулсът на електрона ще се окаже равен на p:

$$\varphi(p) \equiv \langle \text{имп. } p \mid \psi \rangle. \qquad (14.72)$$

Като заместим (14.25) в (14.24), ще получим

$$\varphi(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ipx/\hbar} K e^{-x^2/4\sigma^2}\,dx, \qquad (14.28)$$

което може да се запише също във вида

$$K e^{-p^2\sigma^2/\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(x+2ip\sigma^2/\hbar)^2}{4\sigma^2}}\,dx. \qquad (14.29)$$

Ние можем сега да направим субстанцията $u = x + 2ip\sigma^2/\hbar$, след което интегралът се смята:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2/4\sigma^2}\,du = 2\sigma\sqrt{\pi}. \qquad (14.30)$$

Математиците вероятно не биха харесали този начин на пресмятане, обаче независимо от това крайният резултат е верен

$$\varphi(p) = (8\pi\sigma^2)^{1/4} e^{-p^2\sigma^2/\hbar^2}. \qquad (14.31)$$

Ние стигнахме до интересен резултат — разпределението на амплитудите по p има съвсем същата математическа форма като разпределението на амплитудите по x, но с друга ширина на гаусовата крива. Това може да се запише така:

$$\varphi(p) = (2\pi\eta^2)^{-1/4} e^{-p^2/4\eta^2}, \qquad (14.32)$$

където полуширината η на разпределението по p е свързана с полуширината σ на разпределението по x с формулата

$$\eta = \frac{\hbar}{2\sigma}. \qquad (14.33)$$

---

[1] Тук е използуван фактът, че $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-t^2}dt = \sqrt{\pi}$.

Нашият резултат означава следното: ако разпределението по x се направи много тясно, като σ се вземе достатъчно малко, то η ще стане голямо и разпределението по p силно се разширява. Или обратно, ако разпределението по p е тясно, то съответствува на широко разпределение по x. Ние можем, ако искате, да разглеждаме η и σ като някаква мярка в неопределеността на локализация на импулса и координатата. Ако η и σ означим съответно с Δp и Δx, тогава (14.33) приема вида

$$\Delta p \Delta x = \frac{\hbar}{2} \cdot \tag{14.34}$$

Ето кое е интересно: може да се докаже, че при всеки друг вид на разпределенията по x и p произведението $\Delta p \Delta x$ не може да стане по-малко от това, което се получи. Гаусовското разпределение дава най-малката възможна стойност на произведението на средноквадратичните отклонения. В общия случай

$$\Delta p \Delta x \geqslant \frac{\hbar}{2} \cdot \tag{14.35}$$

Това е количествената формулировка на принципа за неопределеността на Хайзенберг, който качествено ни е известен отдавна. Ние обикновено изказвахме следното приблизително твърдение: най-малката стойност на произведението $\Delta p \Delta x$ — това е число от порядъка на $\hbar$.

14-4. Нормировка на състоянията с определена координата

Сега ние ще се върнем към обсъждане на онези изменения в нашите основни уравнения, които трябва да се направят, в случай че се работи с континуум от базисни състояния. Когато имаме краен брой базисни състояния, фундаменталното условие, което системата от базисни състояния трябва да удовлетворява, има вида

$$\langle i \mid j \rangle = \delta_{ij} . \tag{14.36}$$

Ако частицата пребивава в едно базисно състояние, амплитудата за нейното пребиваване в друго базисно състояние е равна на нула. С помощта на подходяща нормировка амплитудата $\langle i \mid j \rangle$ може да се определи така, че тя да е равна на единица. И двете условия се съдържат в (14.36). Сега ние искаме да разберем как трябва да се видоизмени това съотношение, когато се работи с базисните състояния на частицата върху правата. Ако е известно, че частицата се намира в едно от базисните състояния $\mid x \rangle$, каква е амплитудата за това, че тя пребивава в друго базисно състояние $\mid x' \rangle$? Ако x и x' са две различни точки върху правата, амплитудата $\langle x \mid x' \rangle$, разбира се, е равна на нула, което е в съгласие с равенството (14.36). Но когато x и x' са равни, амплитудата $\langle x \mid x' \rangle$ няма да бъде равна на единица поради същата стара проблема за нормировката. За да видим как трябва да се подправи всичко, ще се върнем към (14.19) и ще приложим това уравнение за частния случай, когато състоянието $\mid \varphi \rangle$ е чисто и просто базисното състояние $\mid x' \rangle$. Тогава получаваме

$$\langle x' \mid \psi \rangle = \int \langle x' \mid x \rangle \, \psi(x) \, dx. \tag{14.37}$$

По-нататък амплитудата $\langle x \mid \psi \rangle$ е точно въведената от нас функция $\psi(x)$. Подобно на това и амплитудата $\langle x' \mid \psi \rangle$, понеже тя се отнася за същото състояние ψ, е функция на променливата x', а именно $\psi(x')$. Затова (14.37) може да се препише така:

$$\psi(x') = \int \langle x' \mid x \rangle \, \psi(x) \, dx. \tag{14.38}$$

Написаното равенство трябва да е изпълнено за всяко състояние ψ и следователно за всяка функция $\psi(x)$. А това изискване трябва напълно да определя природата на функцията $<x \mid x'>$, която е просто една функция, зависеща от x и x'.

Нашата задача се състои в това да намерим такава функция $f(x, x')$, която след умножаване с $\psi(x)$ и интегриране по всички x дава точно величината $\psi(x')$. Но оказва се, че не съществува математическа функция, която да има това свойство! Или по-точно, не съществува нищо такова, което ние обикновено разбираме под думата „функция".

Да изберем някаква стойност на x', например 0, и да определим амплитудата $<0 \mid x>$ като някаква функция, да речем $f(x)$. Тогава (14.38) се превръща в

$$\psi(0)=\int f(x)\,\psi(x)\,dx. \tag{14.39}$$

Какъв вид функция $f(x)$ би могла да удовлетвори такова уравнение? Щом интегралът не трябва да зависи от това, какви стойности приема $\psi(x)$ при стойности на x, различни от нула, то ясно е, че $f(x)$ трябва да бъде избрана така, че да е равна на нула за всички стойности на x освен за $x=0$. Но ако функцията $f(x)$ навсякъде е равна на нула, интегралът ще бъде също така равен на нула и уравнението (14.39) не ще може да бъде удовлетворено. Възниква невъзможна ситуация: на нас ни трябва функция, равна на нула навсякъде освен в една точка, която все пак да дава краен интеграл. Какво пък, щом ние не сме в състояние да намерим функция, която да има такова поведение, най-естественият изход е просто *да кажем*, че функцията $f(x)$ се *определя* от уравнението (14.39). И именно $f(x)$ е такава функция, която превръща (14.39) в правилно равенство. Функцията, която има такива свойства, е била открита най-напред от Дирак и носи неговото име. Ние ще я означим със символа $\delta(x)$. Всичко, което се твърди за нея, е че функцията $\delta(x)$ има странно свойство: ако тя се постави вместо $f(x)$ в (14.39), интегралът ще избере онази стойност, която $\psi(x)$ приема при $x=0$; и тъй като интегралът не бива да зависи от $\psi(x)$ за стойности на x, различни от нула, то функцията $\delta(x)$ трябва да е равна на нула за всички x освен за $x=0$. С една дума, ние пишем

$$<0 \mid x>=\delta(x), \tag{14.40}$$

където $\delta(x)$ се определя от равенството

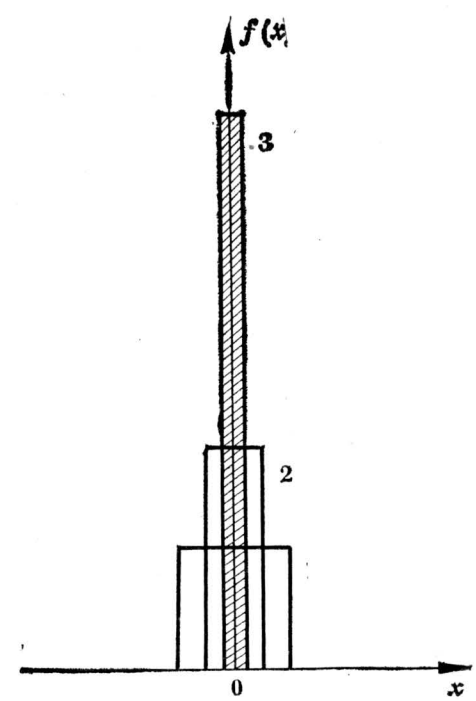
$$\psi(0)=\int \delta(x)\,\psi(x)\,dx. \tag{14.41}$$

Погледнете сега какво ще стане, ако вместо ψ в (14.41) поставим частната функция „1". Тогава получаваме

$$1=\int \delta(x)\,dx. \tag{14.42}$$

С други думи, функцията $\delta(x)$ има това свойство, че навсякъде, освен при $x=0$, тя е равна на нула, но интегралът от нея е краен и е равен на единица. Налага се да си въобразим, че функцията $\delta(x)$ има в една точка такава фантастична безкрайност, че пълната площ под нея се оказва равна на единица.

Как да си представим формата на δ-функцията на Дирак? Един от начините е да си въобразим една редица от правоъгълници (или каквато искате друга фигура с връх), които стават все по-тесни и все по-високи, съхранявайки постоянно под себе си площ, равна на единица, както е показано на фиг. 14.2. Интегралът от тази функция в граници от $-\infty$ до $+\infty$ винаги е равен на единица. Ако вие я умножите на произволна функция $\psi(x)$ и проинтегрирате произведението, ще получите нещо, приблизително съвпадащо със стойността на функцията при $x=0$, като приближението става все по-добро в зависимост от превръщането на



Фиг. 14.2. Редица от функции, ограничаващи единична площ, видът на които все повече и повече се приближава до вида на δ-функцията

правоъгълниците във все по-тесни. Ако искате, вие можете да си представите δ-функцията с помощта на такъв род граничен процес. Но единственото важно нещо тук е това, че δ-функцията е определена така, че (14.41) да е *вярно* за всяка вълнова функция $\psi(x)$. Това определя еднозначно δ-функцията. Нейните свойства тогава се получават точно такива, каквито казахме.

Ако заменим аргумента x на δ-функцията с $x-x'$, съотношенията, написани по-горе, приемат вид

$$\delta(x-x')=0 \qquad x' \neq x$$

$$\int \delta(x-x')\,\psi(x)\,dx=\psi(x'). \tag{14.43}$$

Ако (в 14.38) вместо амплитудата $\langle x \mid x' \rangle$ заместим $\delta(x-x')$, това уравнение ще бъде удовлетворено. В крайна сметка получаваме, че за нашите базисни състояния с координата x условието, съответстващо на (14.36), има вид

$$\langle x' \mid x \rangle = \delta(x-x'). \tag{14.44}$$

Сега ние завършихме всички необходими видоизменения на нашите основни уравнения, които са необходими за работа с континуума от базисни състояния, съответстващи на точките върху правата. Обобщението за случай на три измерения е напълно очевидно: първо координатата x се заменя с вектора $\mathbf{r}$; второ, интегралите по x се заменят с интеграли по x, y и z (с други думи, интегралите стават обемни); трето, едномерната δ-функция трябва просто да се замени с произведението на три δ-функции — на x, на y и на z, т. е. с $\delta(x-x')\,\delta(y-y')\,\delta(z-z')$. Събирайки всичко заедно, получаваме следната съвкупност от уравнения за амплитудите на частицата в тримерния свят:

$$\langle \varphi \mid \psi \rangle = \int \langle \varphi \mid \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} \mid \psi \rangle\, d\ \text{Обем} \tag{14.45}$$

$$\langle \mathbf{r} \mid \psi \rangle = \psi(\mathbf{r})$$

$$\langle \mathbf{r} \mid \varphi \rangle = \varphi(\mathbf{r}). \tag{14.46}$$

$$\langle \varphi \mid \psi \rangle = \int \varphi^*(\mathbf{r})\,\psi(\mathbf{r})\,d\ \text{Обем} \tag{14.47}$$

$$\langle \mathbf{r}' \mid \mathbf{r} \rangle = \delta(x-x')\,\delta(y-y')\,\delta(z-z'). \tag{14.48}$$

А какво става, когато имаме не една частица, а повече? Ние ще ви разкажем как се постъпва при две частици и вие веднага ще разберете какво трябва да правите в случай на по-голям брой частици. Нека имаме две частици; да ги наречем № 1 и № 2. Какво можем да използуваме в качество на базисни състояния? Можем да зададем една напълно приемлива съвкупност, като кажем, че частица № 1 се намира в точка x_1, а частица № 2 — в точка x_2 и да запишем това във вида $\mid x_1, x_2 \rangle$. Забележете, че посочването на координатата *само на едната частица не определя* базисно състояние. Всяко базисно състояние трябва да определя условията на разглежданата система изцяло. Вие не бива да мислите, че всяка частица се движи независимо като една тримерна вълна. Всяко физическо състояние $\mid \psi \rangle$ може да се определи, като се зададат всички амплитуди $\langle x_1, x_2 \mid \psi \rangle$ за това, че двойката частици ще бъде открита в x_1 и x_2. Ето защо тази обобщена амплитуда е функция на *две* съвкупности от координати x_1 и x_2. Вие виждате, че такава функция вече не е вълна в смисъл на някакво хармонично движение, което се разпространява по трите пространствени измерения. Това също тъй не е просто произведение на две самостоятелни вълни, по една за всяка частица. Това в общия случай е някаква вълна в едно шестмерно пространство, определено от числата x_1 и x_2. Ако в природата има две взаимодействуващи частици, ние нямаме начин да опишем това, което става с една от частиците, опитвайки се да напишем вълнова функция само за нея. Известните парадокси,

които ние разглеждахме в първите глави (където се обявяваше, че измерванията, извършени над една частица дават възможност да се предскаже какво ще се случи с другата, или това, че те могат да разрушат интерференцията), са причинили на хората много неприятности, тъй като стремежът е бил да се намери вълнова функция за една отделна частица вместо правилната вълнова функция на координатите на двете частици. Пълно описание може да бъде проведено правилно само в термините на функции от координатите на двете частици.

14-5. Уравнение на Шрьодингер

Досега ние просто имахме грижата за това, как да запишем състоянията, които да посочват, че електронът може да се намира където и да било в пространството. Сега трябва да се погрижим за включване в нашето описание на *физиката* на това, което може да се случи при едни или други обстоятелства. Както и преди, трябва да се помисли за това, как състоянията се изменят с времето. Ако ние имаме състояние $|\psi>$, което малко по-късно преминава в състояние $|\psi'>$, ние можем да опишем положението във всеки момент, като превърнем вълновата функция (т. е. просто амплитудата $<\mathbf{r}\mid\psi>$) във функция не само на координатите, но и на времето. Тогава частицата може да се описва при дадените условия, като се задава изменящата се във времето вълнова функция $\psi(\mathbf{r}, t)=\psi(x, y, z, t)$. Тази изменяща се във времето вълнова функция описва еволюцията на последователните състояния, която произлиза с течение на времето. Това е така нареченото „координатно представяне"; то дава проекциите на състоянието $|\psi>$ върху базисните състояния $|\mathbf{r}>$ и не винаги може да се счита за най-удобно, но ние ще започнем с него.

В гл. 6 ние описахме на езика на хамилтониана H_{ij} как състоянията се менят с времето. Ние видяхме, че вариацията по времето на различните амплитуди се дава от матричното уравнение

$$i\hbar\frac{dC_i}{dt}=\sum_i H_{ij}C_j\,. \tag{14.49}$$

Това уравнение показва, че изменението на всяка от амплитудите с времето е пропорционално на сумата на всички останали амплитуди C_j с коефициенти H_{ij}.

Как трябва да изглежда равенството (14.49) в случай на континуума базисни състояния $|x>$? Спомнете си най-напред, че 14.49) може също да се запише във вида

$$i\hbar\frac{d}{dt}<i\mid\psi>=\sum_j<i\mid\hat{H}\mid j><j\mid\psi>.$$

Сега е ясно какво да се прави. За x-представянето следва да се пише

$$i\hbar\frac{d}{dt}<x\mid\psi>=\int<x\mid\hat{H}\mid x'><x'\mid\psi>\,dx'. \tag{14.50}$$

Сумата по базисните състояния $|j>$ се заменя с интеграл по x'. Тъй като матричният елемент $<x\mid\hat{H}\mid x'>$ трябва да бъде някаква функция на x и x', да го запишем като $H(x, x')$, което съответствува на H_{ij} в (14.49). Тогава (14.50) съвпада с равенството

$$i\hbar\frac{d}{dt}\psi(x)=\int H(x, x')\,\psi(x')\,dx', \tag{14.51}$$

където

$$H(x, x')\equiv<x\mid\hat{H}\mid x'>.$$

Съгласно (14.51) бързината на изменение на ψ в точката x зависи от стойностите на ψ във всички други точки x'; множителят $H(x, x')$ е амплитудата (за единица време) затова, че електронът ще премине от точка x' в x. Оказва се обаче, че *в природата тази амплитуда навсякъде, освен в точките x', много близки до x, е равна на нула.* Това означава, както ние видяхме от примера с атомната верига в началото на главата [вж. (14.12)], че дясната част на (14.51) може да бъде изцяло изразена само посредством ψ и нейните производни по x в точката x.

За частица, която се движи свободно в пространството без да изпитва действието на каквито и да е сили и пертурбации, правилният физически закон е такъв

$$\int H(x, x')\,\psi(x')\,dx' = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2}\,\psi(x).$$

Откъде се получава това? Това не може да се изведе от нещо известно вече. Това е родено в главата на Шрьодингер, това е измислено от него в битката за осмисляне на експерименталните наблюдения в реалния свят. Може би някакъв ключ за това, защо трябва да бъде така, ще ви дадат размишленията над нашия извод на уравнението (14.12), което следваше от разглеждането на разпространението на електрона в кристала.

Разбира се, от свободните частици ползата е малка. Какво става, ако към частицата се приложат сили? Е, ако действуващата на частицата сила може да бъде описана с помощта на скаларния потенциал $V(x)$ (което означава, че става дума не за магнитни сили, а за електрични) и ако ние се ограничим с ниски енергии, за да имаме право да пренебрегваме всички сложности, които възникват при релативистично движение, хамилтонианът, който има място в реалния свят, е такъв

$$\int H(x, x')\,\psi(x')\,dx' = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2}\,\psi(x) + V(x)\,\psi(x). \tag{14.52}$$

И отново вие ще получите някакъв ключ за произхода на това уравнение, ако се върнете към движението на електрона в кристала и видите как трябва да се изменят уравненията при условие, че енергията на електрона се мени бавно от атом към атом, както би било, ако към кристала е приложено електрично поле. Тогава членът E_0 в (14.7) бавно ще се изменя в зависимост от мястото и ще съответствува на новия член, който се появява в (14.52).

[Вас може да ви удиви това, защо преминахме направо от (14.51) към (14.52), а не дадохме правилен израз за амплитудата $H(x, x') = \langle x \mid \widehat{H} \mid x' \rangle$. Работата е в това, че $H(x, x')$ може да се напише само с помощта на необикновени алгебрични функции, а интегралът в дясната част на (14.51) се изразява чрез привични неща. Ако това наистина ви е интересно, тогава гледайте: $H(x, x')$ може да се запише така

$$H(x, x') = -\frac{\hbar^2}{2m}\,\delta''(x-x') + V(x)\,\delta(x-x'),$$

където δ'' означава втората производна на δ-функцията. Тази доста странна функция може да се замести с малко по-удобния и напълно равнозначен с нея алгебричен израз

$$H(x, x') = \left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right\}\delta(x-x').$$

Ние *няма да използуваме* тези формули, а ще работим направо с (14.52).]

Ако сега вземем израза (14.52) и го поставим в (14.50) вместо интеграла, то за $\psi(x) = \langle x \mid \psi \rangle$ ще се получи диференциалното уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + V(x)\, \psi(x). \qquad (14.53)$$

Съвсем очевидно е какво трябва да се напише вместо (14.53), ако ни интересува тримерно движение. Необходимо е само $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ да се замени с

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

а $V(x)$ — с $V(x, y, z)$. За електрон, движещ се в поле с потенциал $V(x, y, z)$, амплитудата $\psi(x, y, z)$ удовлетворява диференциалното уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi. \qquad (14.54)$$

Това уравнение се нарича уравнение на Шрьодингер и е било първото известно квантовомеханично уравнение. То е написано от Шрьодингер, преди да е било открито кое да е описано в този том уравнение.

Макар че ние тук стигнахме до него съвсем по друг път появяването на това уравнение през 1926 г. е било велик исторически момент, отбелязъл раждането на квантовомеханичното описание на материята. Много години вътрешната атомна структура на веществото е била велика тайна. Никой не е бил в състояние да разбере какво скрепя веществото, защо съществува химическата връзка и особено това, как може атомите да бъдат устойчиви. Макар че Бор съумял да даде описание на вътрешното движение на електрона в атома на водорода, което като че ли обяснявало наблюдавания спектър на лъчите, изпускани от този атом, причината, защо електроните се движат именно така, оставала тайна. Шрьодингер, откривайки истинското уравнение на движение на електроните в мащабите на атома, ни е снабдил с теория, която позволява да се пресметнат атомните явления количествено, точно и подробно. По принцип това уравнение може да обясни всички атомни явления освен онези, които са свързани с магнетизма и теорията на относителността. То обяснява нивата на атомните енергии и всичко, което се отнася до химическата връзка. Но, разбира се, това е само обяснение по принцип. Математиката много скоро става толкова сложна, че точно може да се решават само най-простите задачи. Само атомите на водорода и на хелия единствено са пресметнати с висока точност. Обаче по пътя на различни приближения, понякога твърде съмнителни, може много да се разбере и за по-сложните атоми и за химическата връзка между молекулите. Някои от тези приближения бяха показани в предходните глави.

Уравнението на Шрьодингер в този вид, в който ние го записахме, не включва никакви магнитни ефекти. Те наистина може да бъдат взети под внимание приблизително, като се добавят в уравнението още други членове. Но както ние се убедихме по-рано, магнетизмът е ефект, съществено релативистичен, така че правилното описание на движението на електрона в произволно електромагнитно поле може да се обсъжда само в рамките на съответно релативистично уравнение. Правилно релативистично уравнение на движение на електрона е било открито от Дирак една година след като Шрьодингер написва своето уравнение; уравнението на Дирак има съвсем друг вид. Ние няма да успеем да го изучим тук.

Преди да преминем към разглеждане на някои следствия от уравнението на Шрьодингер, добре би било да покажем как то изглежда в случай на система от много частици. Ние няма да използуваме това уравнение, а просто искаме да ви го покажем, за да подчертаем, че вълновата функция ψ не е просто обикновена вълна в пространството, а функция на много променливи. Ако частиците са много, уравнението има вида

$$-i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3,\ldots)}{\partial t}=-\sum_i\frac{\hbar^2}{2m_i}\left\{\frac{\partial^2\psi}{\partial x_i^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y_i^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z_i^2}\right\}$$

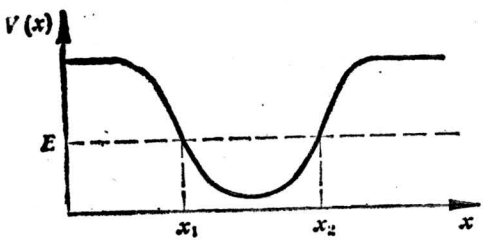
$$+V(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3,\ldots)\psi. \qquad (14.55)$$

Потенциалната функция V съответствува в класическия случай на пълната потенциална енергия на всички частици. Ако на частиците не действуват външни сили, функцията V е просто електростатичната енергия на взаимодействие на всички частици. Иначе казано, ако зарядът на i-тата частица е равен на Z_iq_e, функцията V просто е равна на[1]

$$V(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3,\ldots)=\frac{1}{2}\sum_{\substack{\text{По всички}\\ i\neq j}}\frac{Z_iZ_j}{r_{ij}}e^2. \qquad (14.56)$$

14-6. Квантуване на енергетичните нива

В една от следващите глави ще се занимаем по-подробно с решаването на уравнението на Шрьодингер, като разгледаме някакъв конкретен пример. А сега ние искаме да ви покажем как се получава едно от най-забележителните следствия от уравнението на Шрьодингер — този поразителен факт, че от едно диференциално уравнение, в което влизат само непрекъснати функции на непрекъснати пространствени променливи, могат да възникнат квантови ефекти, като например дискретните енергетични нива. Ние трябва да разберем следния съществен факт: как може да се случи така, че енергията на електрона, попаднал в някакъв потенциален „кладенец“ и принуден да остава в определена област на пространството, с необходимост приема стойности само от една точно определена дискретна съвкупност.



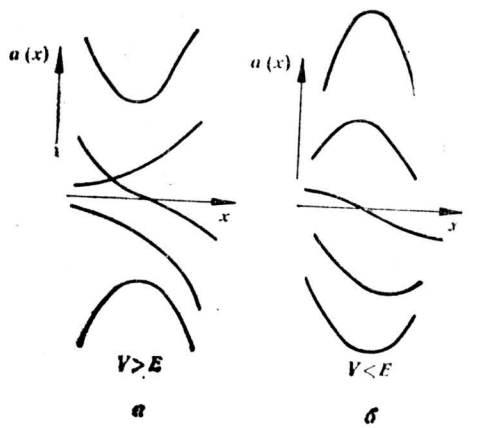
Фиг. 14.3. Потенциална яма за частица, движеща се по оста x

Нека имаме случай на едномерно движение на електрона, когато потенциалната енергия се изменя с x така, както е показано на фиг. 14.3. Да предположим, че потенциалът е статичен: той не се изменя с времето. Както вече постъпвахме много пъти нека потърсим решение, отговарящо на състояния с определена енергия, т. е. с определена честота. Да изпробваме такава форма на решението

$$\psi=a(x)\,e^{-tEt/\hbar}. \qquad (14.57)$$

Ако заместим тази функция в уравнението на Шрьодингер, ще видим, че функцията $a(x)$ трябва да удовлетворява следното диференциално уравнение

$$\frac{d^2a(x)}{dx^2}=\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]\,a(x). \qquad (14.58)$$



Фиг. 14.4. Възможни форми на вълновата функция $a(x)$ при $V>E$ и при $V<E$

Това уравнение показва, че каквото и да е x, втората производна на $a(x)$ по x е пропорционална на $a(x)$ с коефициент на пропорционалност $V-E$. Втората производна на $a(x)$ е скоростта на изменение на наклона на $a(x)$. Ако потенциалът V е по-голям от енергията E на частицата, скоростта на изменение на наклона на $a(x)$ ще има същият знак като $a(x)$. Това означава, че кривата $a(x)$ е изпъкнала към оста x, т. е. малко или много следва хода на положителната или отрицателната експонента $e^{\pm x}$. Това означава, че в областта наляво от x_1 [вж. (фиг. 14.3)], където V е по-голямо от предполагаемата енергия E, функцията $a(x)$ ще напомня една от кривите на фиг. 14.4, *а*.

Ако потенциалната функция V е по-малка от енергията E, знакът на втората производна на $a(x)$ по x е обратен на знака на самата функция $a(x)$ и кривата $a(x)$ винаги ще бъде изгъната към оста x, подобно на някоя от кривите на фиг. 14.4, *б*. Решението в тази област приема форма на отделни късове от синусоиди.

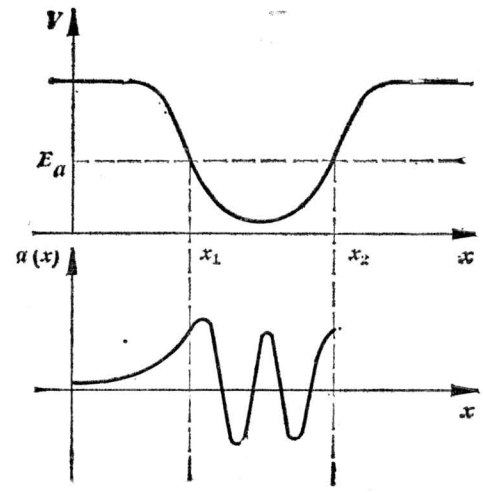
[1] Вие помните, че още по-рано се условихме да пишем $e^2=q_e^2/4\pi\varepsilon_0$.

Сега да погледнем, можем ли графически да построим решения на функцията $a(x)$, която съответствува на частица с енергия E_a при потенциал V, показан на фиг. 14.5. Щом ни интересува такова положение, когато частицата е затворена *вътре* в потенциалната яма, ние ще търсим решения, при които амплитудата на вълната има много малки стойности, когато x се намира извън границите на потенциалната яма. Ние можем много лесно да си представим крива, наподобяваща дадената на фиг. 14.5, която се стреми към нула при големи отрицателни x и плавно нараства с приближаването на x към точка x_1. Тъй като V в точката x_1 е равно на E_a, кривината на функцията в тази точка е равна на нула. Между x_1 и x_2 величината $V - E_a$ е винаги отрицателна, така че функцията $a(x)$ през цялото време ще бъде изгъната към оста x, а нейната кривина е толкова по-голяма, колкото е по-голяма разликата между E_a и V. Ако продължим кривата в областта между x_1 и x_2, тя ще има примерно такъв ход, като показания на фиг. 14.5.

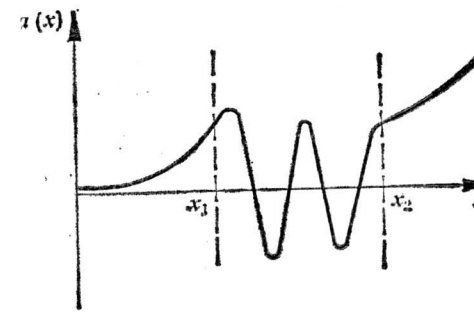
Сега да продължим тази крива надясно от x_2. Там тя се закривява далеч от оста и се стреми към големи положителни стойности (фиг. 14.6). За избраната от нас енергия E_a решението $a(x)$ расте с нарастване на x все по-силно. Действително нали *кривината* на решението $a(x)$ също нараства (ако потенциалът остава почти константен). Амплитудата стремително нараства до гигантски мащаби. Какво означава този ход? Просто това, че частицата не е „свързана“ с потенциалната яма. Тя може да бъде намерена *извън* ямата с безкрайно по-голяма вероятност, отколкото *вътре* в ямата. При построеното от нас решение е много, много по-вероятно да намерим електрона в точка $x = +\infty$, отколкото където и да е другаде. По такъв начин на нас не ни се удаде да намерим решение за свързана частица.

Тогава да опитаме, като вземем друга енергия, да речем малко по-голяма от E_a, например E_b (фиг. 14.7). Ако условията отляво остават същите, ние ще получим решение, показано на долната част на фиг. 14.7. На пръв поглед то изглежда по-добро, но в края на краищата се оказва също така лошо, както и решението за E_a, само че сега при нарастване на x величината $a(x)$ приема все по-големи *отрицателни стойности.*

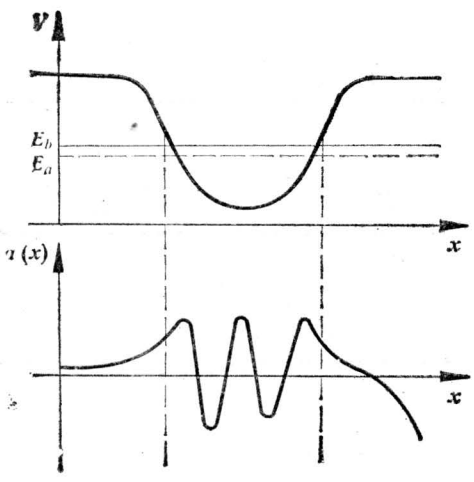
Може би в това е разгадката! Щом едно малко изменение на енергията от E_a към E_b води към това, че кривата се прехвърля от едната страна на оста на другата, тогава може би съществува енергия, лежаща между E_a и E_b, при която кривата ще се стреми към нула при големи x. Това е така и ние сме показали на фиг. 14.8. как може да изглежда решението.



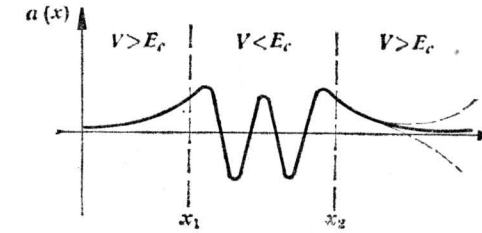
Фиг. 14.5. Вълнова функция за енергия E_a, стремяща се към нула при отдалечаване по x в отрицателна посока



Фиг. 14.6. Вълновата функция $a(x)$ (вж. фиг. 14.5), продължена за аргументи по-големи от x_2



Фиг. 14.7. Вълнова функция $a(x)$ за енергия E_b по-голяма от E_a

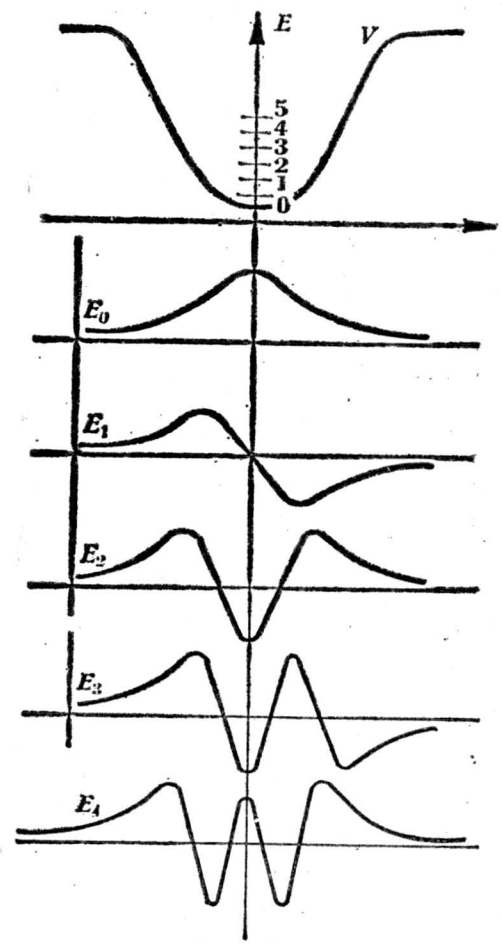


Фиг. 14.8. Вълнова функция за енергия E_c между E_a и E_b

Вие трябва да разбирате, че решението, показано на фигурата е твърде частно решение. Ако ние бихме повишили или понижили енергията дори съвсем незабележимо, функцията би преминала в друга крива, подобно на някоя от пунктираните криви на фиг. 14.8, и отново не биха се получили надлежните условия за свързана частица. Ние стигаме до извода,че ако частицата трябва да се намира в потенциална яма, това може да стане с нея само при напълно определена енергия.

Значи ли това, че частицата, намираща се в свързани състояния в потенциалната яма, може да има само една енергия? Съвсем не! Може да има и други, но не съвсем близки до E_c. Обърнете внимание, че вълновата функция на фиг. 14.8 четири пъти пресича оста x в интервала (x_1,x_2). Ако ние бихме избрали енергия, значително по-ниска от E_c, би могло да се получи решение, което да пресича оста само три пъти, само два пъти, само един път или нито един път. Възможните решения са набелязани на фиг. 14.9. (Може да има и решения, отговарящи на по-високи енергии.) Изводът се състои в това, че ако частицата е вкарана в потенциалната яма, нейната енергия приема само специално определени стойности, които образуват дискретен енергетичен спектър. Вие разбирате сега как диференциалното уравнение може да опише този основен факт на квантовата физика.

Трябва да отбележим само едно нещо. Ако енергията E е по-голяма от горния край на потенциалната яма, дискретни решения вече няма да има и тогава са разрешени всички мислими енергии. Такива решения съответстват на разсейване на свободни частици от потенциална яма. С такива решения ние се срещнахме, когато разглеждахме влиянието на атомните примеси в кристала.



Фиг. 14.9. Функцията $a(x)$ за пет свързани състояния с най-ниски енергии

15

Симетрия и закони за запазване

15-1. Симетрия

15-2. Симетрия и нейното запазване

15-3. Закони за запазване

15-4. Поляризирана светлина

15-5. Разпада на Λ^0

15-6. Резюме на матриците на въртене

Повторете: гл. 52 (том II) „Симетрия на физичните закони"

15-1. Симетрия[1]

В класическата физика не са малко величините (като импулса, енергията и момента на количеството на движение), които се *запазват*. Теореми за запазване на съответните величини съществуват и в квантовата механика. Най-прекрасното в квантовата механика е това, че теоремите за запазване в нея може в известен смисъл да бъдат изведени от нещо друго, докато в класическата механика от тях се изхожда за получаване на други закони. (Разбира се, и в класическата механика може да се постъпи точно така, както в квантовата, но това е възможно само на много високо ниво). В квантовата механика обаче законите за запазване са свързани много тясно с принципите за суперпозиция на амплитудите и със симетрията на физическите системи относно различни изменения. Точно това е темата на настоящата лекция. Независимо от това, че ние ще прилагаме тези идеи главно към запазване на момента на количеството на движение, съществената тук е това, че всичките теореми за запазване на каквито и да е величини винаги са свързани—в квантовата механика—със симетриите на системата.

Ето защо ще започнем с изучаване на въпроса за симетриите на системите. Като много прост пример служат молекулните йони на водорода (впрочем еднакво подходящи са и молекулите на амоняка), които имат по две състояния. В молекулярния йон на водорода ние приемахме за едно базисно състояние случая, когато електронът е разположен около протона № 1, а за второ базисно състояние—това, в което електронът се намира около протон № 2. Тези две състояния (ние ги означихме с $|1\rangle$ и $|2\rangle$) отново са показани на фиг. 15.1, *а*. И тъй като двете ядра са съвсем еднакви, в тази физическа система има определена *симетрия*. С други думи, ако ние *отразим* системата в една равнина, поставена по средата между двата протона (има се пред вид, че всичко, намиращо се от едната страна на равнината, преминава на другата страна), то би възникнала картината, представена на фиг. 15.1, *б*. И тъй като протоните са тъждествени, *операцията отражение* превръща $|1\rangle$ в $|2\rangle$, а $|2\rangle$ в $|1\rangle$. Да означим тази операция с $\hat{P}$ и да напишем

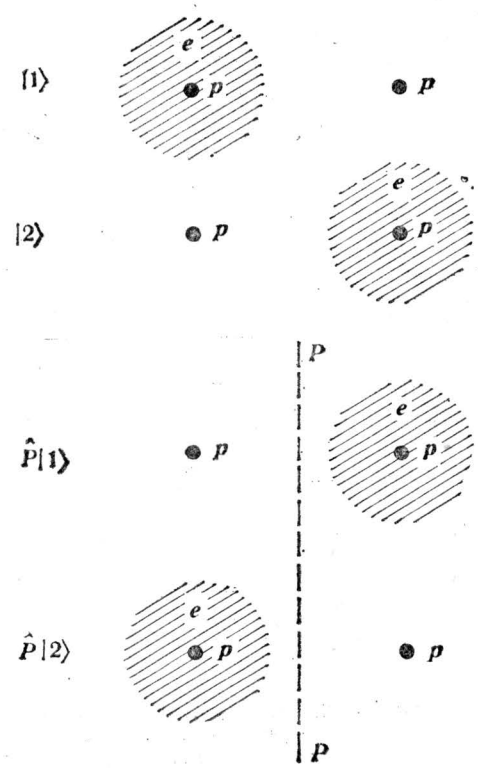
$$\hat{P}\,|\,1\rangle = |\,2\rangle, \hat{P}\,|\,2\rangle = 1\rangle. \qquad (15.1)$$

Значи нашето $\hat{P}$, е оператор в този смисъл, че „нещо прави" със състоянието, за да се получи ново състояние. Интересното тук е това, че $\hat{P}$, действувайки на кое да е състояние, създава някакво *друго* състояние на системата.

По-нататък $\hat{P}$, както всеки друг оператор, с който ние сме се срещали, има матрични елементи, които може да се определят с помощта на обикновени очевидни означения. Именно

$$P_{11} = \langle 1\,|\,\hat{P}\,|\,1\rangle \text{ и } P_{12} = \langle 1\,|\,\hat{P}\,|\,2\rangle$$

са матричните елементи, които се получават, ако $\hat{P}\,|\,1\rangle$ и



Фиг. 15.1. Ако състоянията $|1\rangle$ и $|2\rangle$ се отразят в равнината $P-P$, те ще преминат съответно в състоянията $|2\rangle$ и $|1\rangle$

[1] Литература: А. Р. Эдмондс, Угловые моменты в квантовой механике, в книгата „Деформация атомных ядер", ИЛ, 1958.

$\hat{P}\,|\,2\rangle$ се умножат отляво с $|\,1\rangle$. Съгласно уравнението (15.1) те са равни на:

$$\langle 1\,|\,\hat{P}\,|\,1\rangle = P_{11} = \langle 1\,|\,2\rangle = 0$$

$$\langle 1\,|\,\hat{P}\,|\,2\rangle = P_{12} = \langle 1\,|\,1\rangle = 1. \tag{15.2}$$

По същия начин може да се получат и P_{21}, и P_{22}. Матрицата $\hat{P}$ *относно базисната система* $|\,1\rangle$ и $|\,2\rangle$ е

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{15.3}$$

Ние отново се убеждаваме, че думите *оператор* и *матрица* в квантовата механика практически са взаимозаменяеми. Има, разбира се, леки технически различия, както между думите „числен“ и „число“, но ние не сме такива педанти, че да си пълним с това главите. Така че ние ще наричаме $\hat{P}$ ту оператор, ту матрица независимо от това, определя ли то операция, или реално е използувано за получаване на числова матрица.

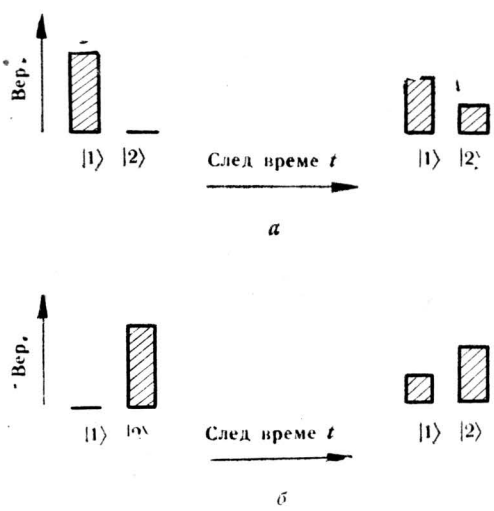
Сега ние бихме искали да обърнем внимание на някои неща. *Да предположим*, че *физиката* на цялата система на молекулярния йон на водорода е сама по себе си *симетрична*. Разбира се, би могло да се случи не така, понеже симетрията зависи от това например, какво има в съседство със системата. Но ако тя е симетрична, тогава с необходимост трябва да бъде справедлива следната идея. Да предположим, че първоначално при $t=0$ системата се намира в състояние $|\,1\rangle$, а след време t ние забелязваме, че системата се оказва в по-сложно състояние—в някаква линейна комбинация на двете базисни състояния. Спомнете си, че в гл. 6 ние свикнахме да представяме „революцията във времето“ чрез умножение с оператора $\hat{U}$. Това означава, че системата след известен малък временен интервал (да речем за определеност след 15 s) ще се окаже в някакво друго състояние. Това състояние може например да се състои от $\sqrt{2/3}$ от състоянието $|\,1\rangle$ и от $i\sqrt{1/3}$ от състоянието $|\,2\rangle$ и ние бихме могли да запишем

$$|\,\psi \text{ на } 15\text{-та секунда}\rangle = \hat{U}(15,0)\,|\,1\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\,1\rangle + i\sqrt{\frac{1}{3}}\,|\,2\rangle. \tag{15.4}$$

Сега да се запитаме: какво ще стане, ако първоначално системата е в състояние $|\,2\rangle$ и при същите условия почакаме 15 s? Ясно е, че ако светът е симетричен (което ние предполагаме), обезателно ще се получи състояние, което е симетрично на (15.4):

$$|\,\psi \text{ на 15-та секунда}\rangle = \hat{U}(15,0)\,|\,2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\,|\,2\rangle + i\sqrt{\frac{1}{3}}\,|\,1\rangle. \tag{15.5}$$

Същите идеи са представени схематично на фиг. 15.2. И тъй, ако *физиката* на системата е симетрична относно някаква равнина и ние сме пресметнали поведението на едно или друго състояние, на нас ни е известно също поведението и на състоянието, което би се получило след отражение на изходното състояние в, равнината на симетрията.



Фиг. 15.2. Ако в симетрична система чистото състояние $|\,1\rangle$ се развива във времето така, както е показано горе (част *а*), то чистото състояние $|\,2\rangle$ ще се развива във времето така, както е показано долу (част *б*)

Съвсем същото нещо може да се изкаже малко по-общо, т. е. малко по-отвлечено. Нека $\hat{Q}$ е каква да е операция, която вие можете да извършвате със системата, *без да изменяте нейната физика*. Примерно за $\hat{Q}$ ние можем да вземем операцията отражение в равнината, разположена по средата между двата атома на водородната молекула. Или в система с два електрона под $\hat{Q}$ би могло да се подразбира операцията транспониране на двата електрона. Трета възможност в една сферично симетрична

система би била операцията завъртване на цялата система на краен ъгъл около някоя ос; от това физиката няма да се измени. Разбира се, във всеки отделен случай ние бихме означили $\hat{Q}$ по своему. В частност чрез $\hat{R}_y$ (θ) ние обикновено ще означаваме операцията „завъртване на системата около оста на ъгъл θ ". Под $\hat{Q}$ ние просто разбираме един от назованите оператори или всеки друг, който оставя цялата физическа ситуация неизменна. Операторът $\hat{Q}$ ще наричаме *оператор на симетрия* на системата.

Ето ви още примери за оператори на симетрия. Ако вие имате атом, а *външно магнитно* или *външно електрично* поле няма, след завъртване на координатната система около произволна ос физическата система остава същата. Молекулата на амоняка е симетрична относно отражение в равнина, успоредна на равнината, в която лежат трите водородни атома (при условие, че няма електрично поле). Ако има електрично поле, при отражението би трябвало да се измени знакът на полето, а това изменя цялата физическа задача. Но щом няма външно поле, молекулата е симетрична.

Сега да разгледаме общия случай. Да положим, че сме почнали със състоянието $|\psi_1>$, а след известно време или под влияние на други физически условия то се превръща в състояние $|\psi_2>$. Да напишем

$$|\psi_2>=\hat{U}\,|\psi_1>. \tag{15.6}$$

[Погледнете формула (15.4).] Представете си сега, че над цялата система извършваме операцията $\hat{Q}$. Състоянието $|\psi_1>$ ще се преобразува в състояние $|\psi_1'>$, което също се записва във вида $\hat{Q}\,|\psi_1>$. А състоянието $|\psi_2>$ се превръща в $|\psi_2'>=\hat{Q}\,|\psi_2>$. И ето, *ако физиката* е симетрична относно $\hat{Q}$ (не забравяйте за това *ако*; това не е общо свойство на системата), тогава, като изчакаме същото време, при същите условия ние ще получим

$$|\psi_2'>=\hat{U}\,|\psi_1'>. \tag{15.7}$$

[Както в (15.5).] Но ние можем да пишем $\hat{Q}\,|\psi_1>$ вместо $|\psi_1'>$ и $\hat{Q}\,|\psi_2>$ вместо $|\psi_2'>$, така че (17.7) може да бъде записано във вида

$$\hat{Q}\,|\psi_2>=\hat{U}\hat{Q}\,|\psi_1>. \tag{15.8}$$

Ако сега $|\psi_2>$ заместим с $\hat{U}\,|\psi_1>$ [вж. (15.6)], получаваме

$$\hat{Q}\hat{U}\,|\psi_1>=\hat{U}\hat{Q}\,|\psi_1>. \tag{15.9}$$

Не е трудно да се разбере какво означава това. По отношение на водородния атом това означава, че „да се отрази и след това малко да се почака" [дясната част на (15.9)] е все същото, като „малко да се почака, а след това да се отрази" [лявата част на (15.9)]. Тези операции трябва да съвпадат при условие, че $\hat{U}$ не се изменя при отражение.

А тъй като (15.9) е справедливо за *всяко* изходно състояние $|\psi_1>$, всъщност това е равенство между операциите, т. е.

$$\hat{Q}\hat{U}=\hat{U}\hat{Q}. \tag{15.10}$$

Ние искахме да получим точно това — *математическа формулировка на симетрията.* Когато е изпълнено условието (15.10), ние казваме, че операторите *комутират*. Тогава „симетрията" може да се определи по следния начин: физическата система е *симетрична* относно операцията $\hat{Q}$, когато $\hat{Q}$ комутира с $\hat{U}$, оператора на развитието във времето. На езика на матриците произведението на два оператора е еквивалентно на произведението на съответните матрици, така че (15.10) е справедливо и за матриците Q и U за система, която е симетрична относно преобразованието $\hat{Q}$.

Впрочем, тъй като за безкрайно малък временен интервал ε ние имаме $\hat{U}=1-i\hat{H}\varepsilon/\hbar$, където $\hat{H}$ е обикновеният хамилтониан на системата (вж. гл.6), лесно е да се види, че когато (15.10) е изпълнено, то е изпълнено и равенството.

$$\hat{Q}\hat{H}=\hat{H}\hat{Q}. \tag{15.11}$$

Така че (15.11) е математическа формулировка на условията за симетричност на дадена физическа ситуация относно оператора $\hat{Q}$. Тя *определя* симетрията.

15-2. Симетрия и нейното запазване

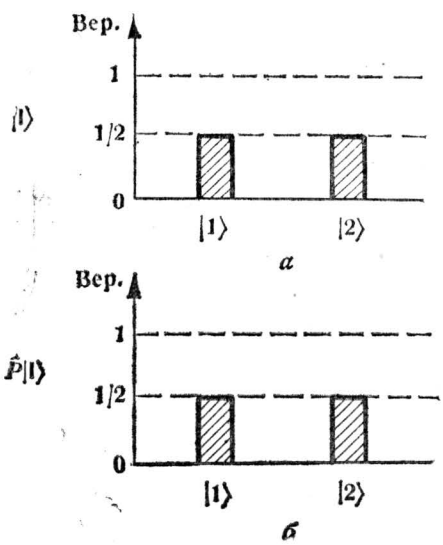
Преди да преминем към приложение на току-що намерения резултат, бихме искали да обсъдим малко самата идея за симетрия. Да предположим, че имаме много специална ситуация: след като действуваме на дадено състояние с оператора $\hat{Q}$, получаваме същото състояние. Това е твърде специален случай, но да допуснем все пак, че така се стичат обстоятелствата, че състоянието $|\psi'\rangle=\hat{Q}\,|\psi_0\rangle$ физически съвпада със състоянието $|\psi_0\rangle$. Това означава, че $|\psi'\rangle$ е равно на $|\psi_0\rangle$, ако не се вземе под внимание наличието на произволен фазов множител.[1] Как да си представим това? Нека имаме например йон H_2^+ в състояние, което някога означавахме с $|I\rangle$. Това състояние има еднакви амплитуди за пребиваване в базисните състояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$. Съответните вероятности са представени като стълбчета на фиг. 15.3,*а*. Ако на състоянието $|I\rangle$ подействуваме с оператора на отражение $\hat{P}$, последният ще „преобърне" състоянието, като размени мястото на $|1\rangle$ с $|2\rangle$, а на $|2\rangle$ с $|1\rangle$; получават се вероятностите, показани на фиг. 15.3, *б*. Пред нас е отново състоянието $|I\rangle$. Ако тръгнем от състоянието $|II\rangle$, вероятностите до и след отражението ще изглеждат също еднакви. Вярно е, че ако погледнем *амплитудите*, разлика все пак има. За състоянието $|I\rangle$ след отражението амплитудите остават *същите*, а за състоянието $|II\rangle$ те приемат обратен знак. С други думи,

$$\begin{aligned}\hat{P}\,|I\rangle&=\hat{P}\left\{\frac{|1\rangle+|2\rangle}{\sqrt{2}}\right\}=\frac{|2\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}}=|I\rangle,\\ \hat{P}\,|II\rangle&=\hat{P}\left\{\frac{|1\rangle-|2\rangle}{\sqrt{2}}\right\}=\frac{|2\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}}=-|II\rangle.\end{aligned} \tag{15.12}$$

Ако напишем $\hat{P}\,|\psi_0\rangle=e^{i\delta}\,|\psi_0\rangle$, за състоянието $|I\rangle$ имаме $e^{i\delta}=1$, а за състоянието $|II\rangle$ $e^{i\delta}=-1$.

Да вземем друг пример. Нека имаме дясно кръгово поляризиран фотон, разпространяващ се по посока на оста z. Ако ние извършим операцията завъртане около оста z, както знаем, това води просто до умножаване на амплитудата с $e^{i\varphi}$, където φ е ъгълът на завъртване.

По-нататък ясно е, *че ако е вярно това*, че операторът $\hat{Q}$ в някакъв момент от времето просто изменя фазата на състоянието (да речем в момент $t=0$), *това ще бъде вярно винаги*. С други думи, ако състоянието $|\psi_1\rangle$ преминава за време t в състояние $|\psi_2\rangle$:



Фиг. 15.3. Състоянието $|I\rangle$ и състоянието $\hat{P}\,|I\rangle$, което се получава чрез отражение на $|I\rangle$ в равнина, минаваща по средата между атомите на йона H_2^+

[1] Вие впрочем можете да докажете, че $\hat{Q}$ е обезателно *унитарен* оператор, т. е. ако той, действувайки на $|\psi\rangle$, води към $|\psi\rangle$, умножено с някакво число, то това число трябва да е от вида $e^{i\delta}$, където δ е реално. Това е само кратка забележка, а доказателството се основава на следното наблюдение. Всяка операция, подобна на отражението или завъртането на даден ъгъл, не води до загуба на каквито и да е частици, така че нормите на $|\psi'\rangle$ и $|\psi\rangle$ трябва да съвпадат; те могат да се различават само с множител, който има чисто реална фаза в експоненциален показател.

$$\hat{U}(t,\ 0)\ |\ \psi_1\rangle = |\ \psi_2\rangle \qquad (15.13)$$

и ако симетрията на физическата картина е такава, че

$$\hat{Q}\ |\ \psi_1\rangle = e^{i\delta}\ |\ \psi_1\rangle, \qquad (15.14)$$

вярно е и това, че

$$\hat{Q}\ |\ \psi_2\rangle = e^{i\delta}\ |\ \psi_2\rangle \qquad (15.15)$$

и ако $\hat{Q}\ |\ \psi_1\rangle = e^{i\delta}\ |\ \psi_1\rangle$, то

$$\hat{Q}\ |\ \psi_2\rangle = \hat{U}\, e^{i\delta}\ |\ \psi_1\rangle = e^{i\delta}\hat{U}\ |\ \psi_1\rangle = e^{i\delta}\ |\ \psi_2\rangle.$$

[Горните равенства следват от (15.10) и (15.13) за симетрична система, долните — от (15.14) и от това, че всяко число, да речем $e^{i\delta}$, комутира с всеки оператор.]

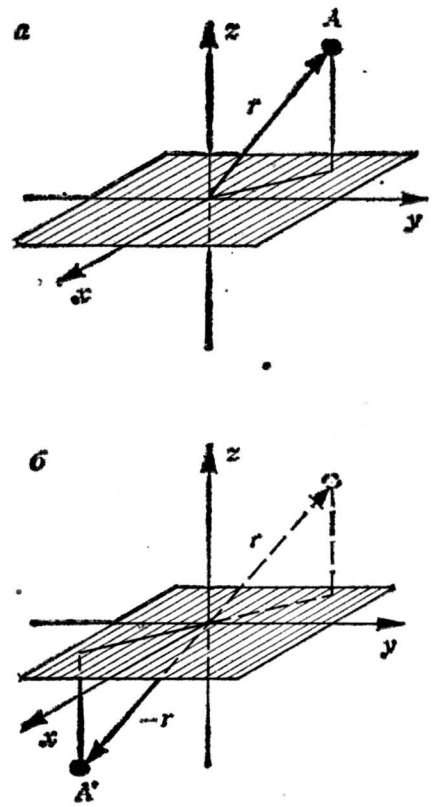
И тъй при някои симетрии това, което е вярно отначало, е вярно винаги. Но нима това не е *закон за запазване*? Да! Той означава, че ако вие погледнете изходното състояние и след като направите някъде настрана кратко пресмятане, откриете, че една операция, която е *операция на определена симетрия* за системата, довежда само до умножение с някакъв фазов множител, вие можете да бъдете сигурни, че същото това свойство ще бъде изпълнено за крайното състояние — същата тази операция умножава и крайното състояние със същия фазов множител. Това ще бъде вярно винаги, дори ако вие не знаете нищо за оня вътрешен механизъм в света, който довежда системата от началното в крайното състояние. Дори ако вие не се погрижите да проследите детайлно това, по какъв именно начин системата преминава от едно състояние в друго, вие все едно имате право да говорите, че ако разглежданият обект първоначално се е намирал в състояние с определен тип симетрия и ако хамилтонианът на този обект е симетричен относно тази операция на симетрия, тогава същият тип симетрия на състоянието остава за вечни времена. Това е основата на всички закони за запазване в квантовата механика.

Да разгледаме частен пример: Вземаме отново оператора $\hat{P}$. Най-напред обаче искаме малко да изменим определението на операцията $\hat{P}$. Нека $\hat{P}$ да е не просто огледално отражение, тъй като то изисква определена равнина, в която лежи огледалната повърхнина. Съществува особен вид отражение, който не изисква посочването на някаква равнина. Ще преопределим операцията $\hat{P}$ по следния начин: най-напред вие отразявате в огледало, намиращо се в равнината z, така че координатата z преминава в $-z$, x остава x и y остава y; след това вие завъртвате системата на ъгъл 180° около оста z, така че x преминава в $-x$, а y преминава в $-y$. Всичко това заедно се нарича *инверсия* — обръщане на координатите. Всяка точка се проектира *през началото на координатната система* в диаметрално противоположно положение. Всички координати на всички точки изменят своя знак. Тази операция, както и преди, ние ще бележим с $\hat{P}$. Тя е представена нагледно на фиг. 15.4 и е малко по-удобна от простата операция отражение, тъй като не е необходимо да се посочва в коя координатна равнина става отражението; достатъчно е само да се даде точката, която е център на симетрията.

Сега да предположим, че имаме състояние $|\ \psi_0\rangle$, което при операцията инверсия преминава в $e^{i\delta}\ |\ \psi_0\rangle$, т. е.

$$|\ \psi_0'\rangle = \hat{P}\ |\ \psi_0\rangle = e^{i\delta}\ |\ \psi_0\rangle. \qquad (15.16)$$

Да направим нова инверсия. След *две* инверсии ние ще се върнем в състоянието, от което сме тръгнали: нищо няма да се измени. Трябва да се получи



Фиг. 15.4. Операцията инверсия $\hat{P}$. Това което се намира в точка A (x, y, z) преминава в точка A' $(-x, -y, -z)$

$$\hat{P} \mid \psi_0' \rangle = \hat{P} \cdot \hat{P} \mid \psi_0 \rangle = \mid \psi_0 \rangle .$$

Но

$$\hat{P} \cdot \hat{P} \mid \psi_0 \rangle + \hat{P} e^{i\delta} \mid \psi_0 \rangle = e^{i\delta} \hat{P} \mid \psi_0 \rangle = (e^{i\delta})^2 \mid \psi_0 \rangle .$$

Оттук следва, че $(e^{i\delta})^2 = 1$. Значи, *ако операторът на инверсията е оператор на симетрия* за някакво състояние, за δ може да има само две възможности

$$e^{i\delta} = \pm 1,$$

а това означава, че или

$$\hat{P} \mid \psi_0 \rangle = \mid \psi_0 \rangle, \quad \text{или} \quad \hat{P} \mid \psi_0 \rangle = - \mid \psi_0 \rangle .$$

В класическата физика, ако дадено състояние е симетрично относно инверсия, тази операция дава отново същото състояние. А в квантовата механика има две възможности: получава се или *същото състояние*, или *същото състояние* със знак *минус*. Когато се получава същото състояние, $\hat{P} \mid \psi_0 \rangle = \mid \psi_0 \rangle$ ние казваме, че състоянието $\mid \psi_0 \rangle$ има *положителна четност*. Ако знакът се изменя, така че $\hat{P} \mid \psi_0 \rangle = - \mid \psi_0 \rangle$, ние казваме, че *четността* на състоянието е *отрицателна*. (Операторът $\hat{P}$ е известен също тъй като оператор на четността). Състоянието $\mid I \rangle$ на йона H_2^+ има положителна четност, състоянието $\mid II \rangle$ — отрицателна [вж. (15.12)]. Има разбира се състояния, несиметрични относно операцията $\hat{P}$; това са състояния без определена четност. Например в системата H_2^+ състоянието $\mid I \rangle$ има положителна четност, състоянието $\mid II \rangle$ — отрицателна, а състоянието $\mid 1 \rangle$ няма определена четност.

Когато казваме, че една операция (например инверсия) е извършена *„над дадена физическа система“*, ние можем да си представим това двояко. Можем да считаме, че всичко, което е било в точка **r**, физически се е преместило в обратната точка **−r**; или можем да считаме, че ние *гледаме* същата система от една нова координатна система x', y', z', свързана със старата посредством формулите $x' = -x$, $y' = -y$ и $z' = -z$. Аналогично, когато говорим за завъртване, можем или да считаме, че завъртваме изцяло физическата система, или че завъртваме координатната система, в която наблюдаваме нашата физическа система, оставяйки последната закрепена в пространството. Тези две гледни точки по същество са равноценни. Те са равноценни и при въртене, *само* че завъртването на *системата* на ъгъл θ е еквивалентно на завъртване на координатната система на *отрицателен* ъгъл $-\theta$. В нашия курс ние досега обикновено сме гледали какво се получава, когато се взема проекцията в новата координатна система. Това, което се получава по този начин, съвпада с онова, което ще се получи, ако оставим предишните координатни оси и завъртим тялото на същия ъгъл, но *„назад“*. Когато вие правите това, не забравяйте да измените знаците на ъглите[1].

Много *закони* на физиката (но не всички) не се изменят при отражение или инверсия на координатите. Те са *симетрични* по отношение на операцията инверсия. Законите на електродинамиката например не се изменят, ако заменим x с $-x$, y с $-y$ и z с $-z$ във *всички* уравнения. Същото се отнася за законите на земното привличане и за силните взаимодействия в ядрената физика. Само при слабите взаимодействия, отговорни за β-разпада, нямаме такава симетрия. (Ние обсъдихме това малко по-подробно в гл. 52, том I.) Но сега ще пренебрегнем β-разпада. Тогава за всяка физическа система, за която може да се счита, че β-разпадът не оказва забележимо влияние (като пример да

[1] В други книги вие може да срещнете формули с други знаци; най-вероятно е в тях да се използуват ъгли, определени по друг начин.

вземем изпускането на светлина от даден атом), хамилтонианът $\hat{H}$ и операторът $\hat{P}$ ще комутират. При тези обстоятелства е вярно следното твърдение: Ако четността на състоянието първоначално е положителна и вие се интересувате от физическата ситуация след известно време, ще видите, че четността остава винаги положителна. Нека например е известно, че атомът, преди да изпусне фотон, се е намирал в състояние с положителна четност. Вие разглеждате цялата тази система (включително и фотона) след изпускането; четността отново се оказва положителна (и точно така би било, ако вие бихте започнали с отрицателна четност). Този принцип се нарича *запазване на четността*. Вие сега разбирате защо думите „запазване на четността“ и „симетрия относно отражения“ са тясно преплетени в квантовата механика. Макар че до неотдавна се считаше, че природата винаги запазва четността, сега е известно, че това *не е така*. Изясни се, че това не е вярно, тъй като β-разпадните реакции, за разлика от други закони на физиката, не са симетрични при инверсия.

Сега можем да докажем една интересна теорема (справедлива дотогава, докато слабите взаимодействия може да се пренебрегнат): всяко състояние с определена енергия, което не е изродено, има строго определена четност. Неговата четност може да бъде или положителна, или отрицателна. (Помните ли, че ние понякога срещахме системи, в които няколко състояния имаха една и съща енергия — такива състояния ние наричаме *изродени*. Нашата теорема не се отнася за тях.)

Ние знаем, че ако $|\psi_0\rangle$ е състояние с определена енергия,

$$\hat{H}\,|\psi_0\rangle = E\,|\psi_0\rangle, \tag{15.18}$$

където E е просто число, енергия на състоянието. Ако имаме *произволен* оператор $\hat{Q}$, който е оператор на симетрия за системата, можем да докажем, че

$$\hat{Q}\,|\psi_0\rangle = e^{i\delta}\,|\psi_0\rangle, \tag{15.19}$$

стига само $|\psi_0\rangle$ да е единственото състояние с дадената енергия. Да разгледаме новото състояние $|\psi_0'\rangle$, което се получава от $|\psi_0\rangle$ след действието на оператора $\hat{Q}$. Ако цялата физика е симетрична, $|\psi_0'\rangle$ трябва да има същата енергия, както и $|\psi_0\rangle$. Но ние нали избрахме случай, когато състоянието с такава енергия е *само едно*, а именно $|\psi_0\rangle$; значи $|\psi_0'\rangle$ трябва да бъде същото това състояние, различаващо се може би само по фаза. Такова е физическото доказателство на теоремата.

Но същото ще последва и от нашата математика. Нашето определяне на симетрията е равенството (15.10) или (15.11), което е валидно за всяко състоние $|\psi\rangle$:

$$\hat{H}\,\hat{Q}\,|\psi\rangle = \hat{Q}\,\hat{H}\,|\psi\rangle. \tag{15.20}$$

Но сега става дума за състоянието $|\psi_0\rangle$, което е състояние с определена енергия, така че $\hat{H}\,|\psi_0\rangle = E\,|\psi_0\rangle$. А щом E е число, то естествено комутира с $\hat{Q}$ и ние имаме

$$\hat{Q}\,\hat{H}\,|\psi_0\rangle = \hat{Q}E\,|\psi_0\rangle = E\hat{Q}\,|\psi_0\rangle,$$

така че

$$\hat{H}\{\hat{Q}\,|\psi_0\rangle\} = E\{\hat{Q}\,|\psi_0\rangle\}. \tag{15.21}$$

Значи $|\psi_0'\rangle = \hat{Q}\,|\psi_0\rangle$ е също състояние на $\hat{H}$ с определена енергия и при това със същото E. Но съгласно нашето предположение има само едно такова състояние; следователно $|\psi_0'\rangle$ трябва да бъде равна на $e^{i\delta}\,|\psi_0\rangle$.

Току-що доказаното от нас се отнася за всеки оператор, стига

той да е оператор на симетрия за физическата система. Ето защо, когато при дадена ситуация разглеждаме само електрични сили и силни взаимодействия (и няма никакъв β-разпад), така че симетрията относно операцията инверсия е напълно допустимо приближение, имаме $\hat{P} \mid \psi> = e^{i\delta} \mid \psi>$. Но ние видяхме също, че $e^{i\delta}$ непременно е равно или на $+1$, или на -1. И тъй всяко състояние с определена енергия (ако то не е изродено), завинаги е снабдено или с положителна, или с отрицателна четност.

15-3. Закони за запазване

Да се обърнем сега към друг интересен пример на операция на симетрия — към въртенето. Ще разгледаме частен случай на оператор, който завърта атомната система на ъгъл φ около оста z. Да означим този оператор с $\hat{R}_z(\varphi)$.[1] Да предположим още, че в нашия физически случай няма никакви влияния, възникващи по дължината на осите x и y. Всички електрични или магнитни полета са успоредни на оста z[2], така че във *външните* условия няма да възникнат никакви изменения при завъртване на цялата система около оста z. Например, ако имаме атом във вакуум и ние завъртим този атом около оста z на ъгъл φ, ще получим същата физическа система.

Тогава съществуват *особени състояния*, притежаващи свойството, че такава операция води към ново състояние, съвпадащо с изходното, умножено с някакъв фазов множител. Ще отбележим, че когато това е така, изменението на фазата трябва винаги да е пропорционално на ъгъла φ. Представете си, че вие бихте поискали да извършите последователно два пъти завъртване на ъгъл φ. Това е равносилно на едно завъртване на ъгъл 2φ. Ако завъртването на ъгъл φ води до умножаване на състоянието $\psi_0>$ с фазовия множител $e^{i\delta}$, така че

$$\hat{R}_z(\varphi) \mid \psi_0> = e^{i\delta} \mid \psi_0>,$$

то две такива завъртвания, извършени едно след друго, биха довели до умножаване на състоянието с множител $(e^{i\delta})^2 = e^{2i\delta}$, тъй като

$$\hat{R}_z(\varphi)\,\hat{R}_z(\varphi) \mid \psi_0> = \hat{R}_z(\varphi)\, e^{i\delta} \mid \psi_0> = e^{i\delta}\,\hat{R}_z(\varphi) \mid \psi_0> = e^{i\delta} e^{i\delta} \mid \psi_0>.$$

Изменението на фазата δ се оказва пропорционално на φ[3]. Ние следователно разглеждаме само онези особени състояния $\mid \psi_0>$, за които

$$\hat{R}_z(\varphi) \mid \psi_0> = e^{im\varphi} \mid \psi_0>, \tag{15.22}$$

където m е някакво реално число.

На нас също ни е известен този забележителен факт, че *ако* системата е симетрична относно завъртването около z и *ако* изходното състояние има това свойство, че за него (15.22) е изпълнено, това състояние и по-късно запазва същото свойство. Значи числото m е много важно. Ако ние знаем неговата стойност в началото, ние я знаем и в края. Числото m, което се запазва, е *константа* (или интеграл) на *движението*. Причината,

---

[1] По-точно ние определяме $\hat{R}_z(\varphi)$ като въртене на физическата система на ъгъл $-\varphi$ около оста z; това е еквивалентно на завъртане на координатната система на ъгъл $+\varphi$.

[2] Ние винаги имаме право да изберем оста z по посока на полето при условие, че неговата посока не се мени и че повече полета няма.

[3] Всички тези разсъждения може да бъдат проведени с по-голяма строгост за въртения на малки ъгли ε. Щом всеки ъгъл φ представлява сумата на известно число n, такива въртения, т. е. $\varphi = n\varepsilon$, то $\hat{R}_z(\varphi) = [\hat{R}_z(\varepsilon)]^n$, като общото изменение на фазата е n пъти по-голямо от изменението, съответстващо на ъгъла ε, и затова е пропорционално на φ.

поради която ние говорим за m, като го поставяме на пръв план, се състои в това, че то не е свързано с каквото и да е определение на ъгъла φ, и още поради това, че на него отговаря съответна величина в класическата механика. В *квантовата механика* ние *избираме* за величината $m\hbar$ (в състояния, подобни на $|\psi_0>$), *названието момент на количеството на движение около оста z*. И тогава ние забелязваме, че при преход към големи системи същата величина е равна на z-компонентата на момента на количеството на движение от класическата механика. Следователно, ако ние имаме състояние, за което завъртването около оста z води просто до умножаване с фазовия множител $e^{im\varphi}$, пред нас е състояние с определен момент на количество на движение около тази ос и моментът на количеството на движение се запазва. Той винаги остава равен на $m\hbar$. Разбира се, въртения може да се правят около произволни оси и запазването на момента на количеството на движение също ще се получава за произволни оси. Вие виждате, че запазването на момента на количеството на движение е свързано с този факт, че когато завъртвате системата, вие получавате отново същото състояние, само че с нов фазов множител.

Сега ще ви покажем колко е обща тази идея. Да я приложим към други закони за запазване, които по своята физическа идея съответстват точно на запазването на момента на количеството на движение. В класическата физика съществува също закон за запазване на импулса и закон за запазване на енергията и интересното е, че те и двата също са свързани с някакви физически симетрии. Да предположим, че имаме една физическа система — атом или сложно ядро, или пък молекула, или каквото и да е,— и ако вземем тази система и я преместим като цяло на ново място, при това явно нищо няма да се измени. Значи ние имаме хамилтониан с това свойство, че той в известен смисъл зависи от *вътрешните координати*, но не зависи от *абсолютното положение* в пространството. При тези обстоятелства съществува специална операция на симетрия, която се нарича отместване в *пространството (транслация)*. Да определим $\hat{D}_x(a)$ като операция на преместване на разстояние a по оста x. Тогава ние можем да извършим тази операция с всяко състояние и да получим ново състояние. И тук отново са възможни твърде специални състояния, които имат това свойство, че когато ги отмествате по оста x на разстояние a, получавате същото състояние (ако не се счита фазовият множител). И така както бе направено по-горе, може да се докаже, че когато това е така, фазата е пропорционална на a. Така че за тези специални състояния можем да пишем

$$\hat{D}_x(a)\,|\,\psi_0> = e^{ika}\,|\,\psi_0>. \qquad (15.23)$$

Коефициентът k, умножен на $\hbar$, се нарича x-та *компонента на импулса*. Това произведение се нарича така, тъй като то съвпада с класическия импулс p_x, когато системата е голяма. Общото твърдение е такова: ако хамилтонианът не се изменя при отместване на системата по оста x и ако първоначално състоянието се характеризира с определен импулс по оста x, този импулс с течение на времето остава неизменен. Пълният импулс на системата до и след определено взаимодействие (разсейване, взрив или каквото и да е) остава един и същ.

Има и друга операция, която е съвсем аналогична на отместването в пространството: отместване във времето. Да предположим, че пред нас са физически обстоятелства, когато *нищо външно* не зависи от времето. И ето при такива обстоятелства ние поставяме нещо в определен момент от времето в дадено състояние и го пускаме на произвола на съдбата. А в друг случай (при нов опит) същото това устройство ние пускаме две секунди по-късно или въобще τ секунди по-късно. И ето, ако при външните условия нищо не зависи от абсолютното време, всичко ще се развива точно така, както преди, и крайното състояние ще

съвпадне с предишното крайно състояние, с изключение само на това, че ще закъснее с време τ. При тези обстоятелства също ще се намерят особени състояния, за които развитието във времето има тази особеност, че закъснялото състояние просто е старото състояние, умножено с фазов множител. И този път също е ясно, че за тези особени състояния изменението на фазата трябва да бъде пропорционално на τ. Можем да напишем

$$\hat{D}_t(\tau) \mid \psi_0> = e^{-i\omega\tau} \mid \psi_0>. \tag{15.24}$$

Общоприето е при определянето на ω да се използува знак минус; при такава уговорка $\omega\hbar$ е *енергията* на системата; тя *се запазва*. И така система с определена енергия е такава система, която при отместване във времето с τ се самовъзпроизвежда с точност до множител $e^{-i\omega\tau}$. (А ние казахме точно това, когато определяхме квантово състояние с дадена енергия, така че всичко се съгласува.) Това означава, че ако системата се намира в състояние с определена енергия и ако хамилтонианът не зависи от t, независимо от това, какво става по-нататък, системата има същата тази енергия във всички по-късни моменти.

И тъй вие разбирате сега каква е връзката между законите за запазване и симетрията в света. Симетрията по отношение на отместванията във времето води към запазване на енергията; симетрията относно положенията върху осите x, y или z води към запазване на съответната компонента на импулса. Симетрията относно завъртване около осите x, y и z води към запазване на x-, y-, и z-компонентата на момента на количеството на движение. Симетрията относно отражения води до запазване на четността. Симетрията по отношение на транспониране на два електрона води към запазване на нещо, за което още няма измислено название, и т. н. Част от тези принципи имат класически аналози, а друга част нямат. В квантовата механика има повече закони за запазване, отколкото това е нужно за класическата механика или поне отколкото обикновено в нея се използуват

За да може вие да четете и други книги по квантова механика, ние ще направим малко техническо отклонение и ще ви запознаем с едно общоприето означение. Операцията отместване във времето е точно онази операция $\hat{U}$, за която ние говорихме по-рано:

$$\hat{D}_t(\tau) = \hat{U}(t+\tau,\ t). \tag{15.25}$$

Много хора предпочитат езика на *безкрайно малките* отмествания във времето или на безкрайно малките премествания в пространството, или завъртване на безкрайно малки ъгли. Тъй като всяко крайно отместване или завъртване на краен ъгъл може да се разглежда като редица последователно извършени безкрайно малки отмествания или завъртвания, често пъти е по-лесно да се направи анализ на този инфинитезимален (безкрайно малък) случай. Операторът на безкрайно малкото отместване Δt във времето е (според определението в гл. 6, том III)

$$\hat{D}_t(\Delta t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\,\Delta t\,\hat{H}. \tag{15.26}$$

Тогава $\hat{H}$ е аналогично на класическата величина, която ние наричаме енергия, защото $\hat{H} \mid \psi>$ се оказва равно на $\mid \psi>$, умножено с константа, а именно, ако $\hat{H} \mid \psi> = E \mid \psi>$, тази константа е енергията на системата.

Същото е в сила и за другите операции. Ако ние направим малко отместване по x, да речем на разстояние Δx, състоянието $\mid \psi>$ *въобще* ще премине в някакво ново състояние $\mid \psi'>$. Ние можем да пишем

$$\mid \psi'> \hat{D}_x(\Delta x) \mid \psi> = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\hat{p}_x\,\Delta x\right) \mid \psi>, \tag{15.27}$$

защото когато Δx се стреми към нула $\mid \psi'>$, трябва от-

ново да се превърне в $|\psi>$, или, което е същото, $\hat{D}_x(0) = 1$, а за малки Δx отклонението на $\hat{D}_x(\Delta x)$ от единица трябва да е пропорционално на Δx. Операторът $\hat{p}_x$, определен по този начин, се нарича оператор на импулса (естествено на неговата x-компонента).

По същите причини за малки завъртвания обикновено пишат

$$\hat{R}_z(\Delta\varphi)\,|\,\psi> = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\hat{J}_z\,\Delta\varphi\right)|\,\psi> \qquad (15.28)$$

и наричаме $\hat{J}_z$ оператор на z-компонентата на момента на количеството на движение. За тези особени състояния, за които $\hat{R}_z(\varphi)\,|\,\psi_0> = e^{im\varphi}\,|\,\psi_0>$, можем за всеки малък ъгъл, да речем $\Delta\varphi$, да разложим дясната част по степените на $\Delta\varphi$ с точност до членове от първи ред и да получим

$$\hat{R}_z(\Delta\varphi)\,|\,\psi_0> = e^{im\,\Delta\varphi}\,|\,\psi_0> = (1 + im\,\Delta\varphi)\,|\,\psi_0>.$$

Сравнявайки това с определението на $\widehat{J_z}$ по формулата (15.28), получаваме

$$\hat{J}_z\,|\,\psi_0> m\hbar\,|\,\varphi_0>. \qquad (15.29)$$

С други думи, ако вие действувате с оператора $\hat{J}_z$ на състояние с *определен момент на количеството* на движение около оста z, получавате това състояние, умножено с $m\hbar$, като $m\hbar$ е равно на z-компонентата на момента на количеството на движение. Всичко е напълно аналогично на действието на $\hat{H}$ върху състояние с определена енергия, при което се получава $E\,|\,\psi>$.

Сега бихме желали да преминем към някои приложения на идеята за запазване на момента на количеството на движение, за да ви покажем тази идея в действие. Работата е там, че всичко е много просто. За това, че моментът на количеството на движение се запазва, вие знаехте и по-рано. Единствено нещо, което трябва да запомните от тази глава, това е, че ако състоянието $|\,\psi_0>$ има такова свойство, че при завъртване на ъгъл φ около оста z то се превръща в $e^{im\varphi}\,|\,\psi_0>$, тогава z-компонентата на момента на количеството на движение е равна на $m\hbar$. Това е всичко, което трябва да се знае, за да се получат редица интересни неща.

15-4. Поляризирана светлина

Преди всичко необходимо е да се провери една идея. В гл 9, § 4 ние показахме, че когато състоянието на дясно поляризирана по кръг светлина се наблюдава от система, завъртяна на ъгъл φ около оста z[1], то се оказва умножено на $e^{i\varphi}$. Не означава ли това, че дясно поляризираните по кръг фотони носят момент на количеството на движение по оста z, равен на единица[2]?

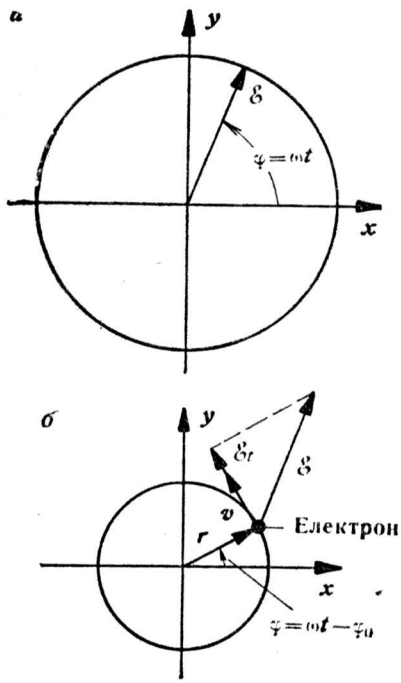
Да, точно така! Това означава още, че когато имаме светлинен сноп, съставен от много фотони, всичките еднакво поляризирани по кръг (както е в класическите светлинни снопове), той ще носи със себе си някакъв момент на количеството на движение. Ако пълната енергия, която снопът отнася за определено време, е W, в него има $N = W/\hbar\omega$ фотони. Всеки фотон носи момент $\hbar$, така че пълният момент на количеството на движение е равен на

[1] Моля за извинение! Този ъгъл има обратен знак по отношение на използувания в гл. 9, § 4.

[2] Като правило моментът на количеството на движение на атомна система се измерва твърде удобно в единици $\hbar$. Тогава може да се каже, че частица със спин $^1/_2$ има по отношение на произволна ос момент на количеството на движение $\pm{}^1/_2$. И въобще, че z-компонентата на момента на количеството на движение е m. Не се налага винаги да се повтаря $\hbar$.

$$J_z = N\hbar = \frac{W}{\omega}. \qquad (15.30)$$

Може ли класически да се докаже, че дяснополяризираната по кръг светлина носи енергия и момент на количеството на движение в отношение W към ω? Наистина, ако всичко е правилно, това би било класическо твърдение — случай, когато може да се премине от квантова към класическа физика. Трябва да се провери потвърждава ли се това от класическата физика. Тогава ще стане ясно имаме ли право да наричаме m момент на количеството на движение. Да си припомним какво е дяснополяризирана светлина в класическия смисъл. Тя се описва от електрично поле с трептяща x-компонента и трептяща y-компонента, отместени по фаза на 90°, така че сумарният вектор $\mathcal{E}$ на електричното поле обикаля по кръг (фиг. 15.5,*а*). Да предположим сега, че сме осветили с такава светлина преграда, която има свойството да я поглъща (или поне част от нея), и да разглеждаме един от атомите на преградата, опирайки се на класическите представи. Ние често представяхме движението на електрона в атома във вид на хармоничен осцилатор, който се привежда в действие от външното електрично поле. Да предположим, че атомът е изотропен, така че с еднакъв успех той може да трепти както по направление на оста x, така и по направление на оста y. По-нататък за поляризираната по кръг светлина отместванията по x и по y са еднакви, макар че изостават едно от друго с 90°. В резултат на това електронът ще се движи по кръг (фиг. 15.5, *б*). Той ще се отмести от положението на равновесие в началото на координатната система на разстояние $\mathbf{r}$ и ще започне да кръжи, изоставайки по някакъв начин по фаза от вектора $\mathcal{E}$. Връзката между $\mathcal{E}$ и $\mathbf{r}$ може да бъде такава, като показаната на фиг. 15.5, *б*. Електричното поле се завърта с течение на времето, но със същата честота се завърта и отместването $\mathbf{r}$, така че относителната ориентация между тези вектори остава една и съща. Да видим сега каква работа се извършва над електрона. Скоростта, с която на електрона се подава енергия, е равна на неговата скорост v, умножена с компонентата $\mathcal{E}_t$, успоредна на тази скорост



Фиг. 15.5. Електрично поле $\mathcal{E}$ на поляризатора по кръг светлина вълна (*а*) и въртене на електрона, който се привежда в движение от поляризирана по кръг светлина (*б*)

$$\frac{dW}{dt} = \mathcal{E}_t\, v. \qquad (15.31)$$

Но вие не може да не забележите, че в това време непрекъснато се увеличава и моментът на количеството на движение на електрона, понеже той през цялото време изпитва действието на момента, който го върти около началото. Въртящият момент е равен на $\mathcal{E}_t r$ и той трябва да е равен на скоростта на изменение на момента на количеството на движение dJ_z/dt:

$$\frac{dJ_z}{dt} = \mathcal{E}_t r. \qquad (15.32)$$

Спомняйки си, че $v=\omega r$, имаме

$$\frac{dJ_z}{dt} = \frac{1}{\omega}.$$

Следователно, ако интегрираме поглъщания пълен момент на количеството на движение, той ще се окаже пропорционален на пълната енергия с коефициент на пропорционалност $\frac{1}{\omega}$, което се съгласува с (15.30). Светлината наистина носи със себе си момент на количеството на движение — една единица ($\times \hbar$), когато тя е дяснополяризирана по кръг по посока на z и минус една единица, когато е лявополяризирана.

Сега да си зададем следния въпрос: ако светлината е линейно поляризирана по оста x, какъв е моментът на количеството на движение? Светлина, която е поляризирана по оста x, може да бъде представена като суперпозиция на дясно- и лявополяризирана светлина. Ето защо има някаква амплитуда за това моментът на количеството на движение да е равен на $+\hbar$ и също та-

кава амплитуда той да е равен на $-\hbar$, така че *определен* момент на количеството на движение тази светлина няма, а има амплитуда да се появи с $+\hbar$ и амплитуда да се появи с $-\hbar$. Интерференцията на тези две амплитуди създава състояние на линейна поляризация за което е еднакво *вероятно* да се окаже с момент на количеството на движение, равен на плюс или минус единица. Макроскопичните измервания, проведени със сноп линейно поляризирана светлина, ще покажат, че той носи нулев момент на количеството на движение, защото сред големия брой фотони, имащи противоположни количества на момента, ще се окаже, че десните са равни на левите и средният момент на количеството на движение ще бъде равен на нула. И в класическата теория вие няма да откриете никакъв момент на количеството на движение, освен ако някъде се окажат следи на някаква кръгова поляризация.

Ние казахме, че за частица със спин 1 величината $\hat{J}_z$ може да има три стойности: $+1$, 0, -1 (трите състояния, които срещахме в опита на Щерн—Герлах).

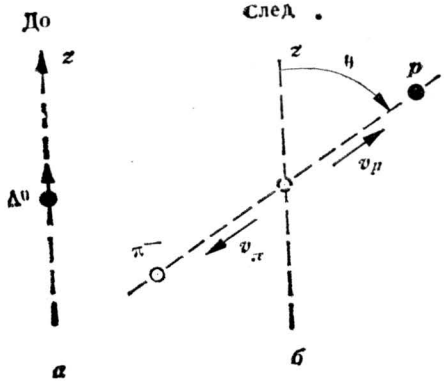
Но светлината има свои нрави: тя има само две състояния. Състояния с нула при нея няма. Тази странна загуба е свързана с това, че светлината не може да се спре на едно място. Една частица в покой със спин j има $2j+1$ възможни състояния със стойности на j_z, изменящи се със стъпка 1 от $-j$ до $+j$. Но оказва се, че ако нещо-си има спин j, масата на това нещо е равна на нула, то за него могат да съществуват само състояния с компоненти $+j$ и $-j$ върху посоката на движението. Например светлината има не три състояния, а две, макар че фотонът е обект със спин 1. Как се съгласува този факт с нашите предишни доказателства, които се опират на това, което произлиза при въртене в пространството, доказателства за това, че за частица със спин 1 са необходими три състояния. Една частица в покой може да бъде завъртяна около произволна ос, без да се измени състоянието на нейния момент. Частиците с нулева маса на покой (например фотоните или неутриното) не могат да се намират в покой; само въртене около оста, съвпадаща с посоката на движението, не изменя състоянието на момента. А въртене около една ос не е достатъчно, за да се докаже, че са необходими непременно три състояния, ако е дадено, че едното от тях при завъртване на ъгъл φ се мени като $e^{i\varphi}$[1].

Още една странична забележка. Въобще някои частици с нулева маса на покой имат *само едно* от двете спинови състояния $(+j, -j)$ относно посоката на движение. За неутриното (частица със спин 1/2) в природата съществуват само състояния с компонента на момента на количеството на движение $-\hbar/2$, *обратна* на посоката на движението (а за антинеутриното — само с компонента по посока на движението, $+\hbar/2$). Когато системата е симетрична относно инверсия (така, че четността се съхранява), нужни са вече двете компоненти $+j$ и $-j$, какъвто е случаят със светлината.

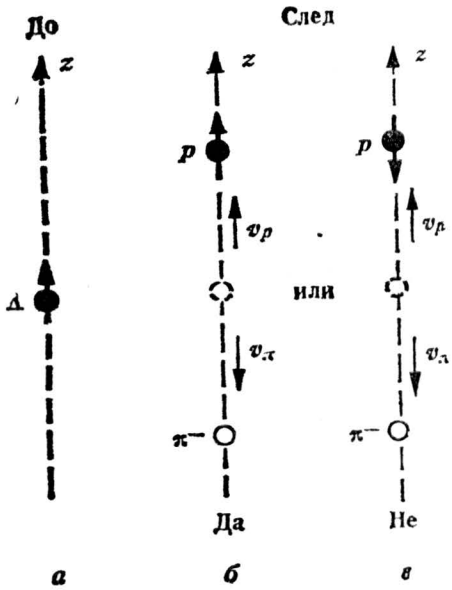
15-5. Разпад на Λ^0

Сега ще дадем пример за това, как теоремата за запазване на момента на количеството на движение се прилага в чисто квантовофизични задачи. Да разгледаме разпада на ламбда-частицата (Λ^0), която се разцепва на протон и π^- мезон посредством слабото взаимодействие:

[1] Ние се опитахме да намерим доказателство поне на това, че компонентата по посока на движението на момента на количеството на движение за частица с нулева маса трябва да бъде кратна например на $\hbar/2$, а не на $\hbar/3$. Но дори използувайки всевъзможните свойства на трансформациите на Лоренц (и много други неща), ние не можахме да се справим с тази задача. Може би това не е така. Би трябвало да се поговори с проф. Вигнер, който знае всичко по тези въпроси.



Фиг. 15.6. Λ^0-частицата със спин насочен нагоре се разпада на протон и пион (в системата на центъра на инерцията).
Каква е вероятността за това, че протонът ще излети под ъгъл θ?



Фиг. 15.7. Две възможности за разпад на частицата Λ^0 със спин насочен нагоре, ако протонът се движи нагоре по оста $+z$.
Моментът се запазва само за схемата на разпада (*б*)

$$\Lambda^0 \longrightarrow p + \pi^-.$$

Нека ни е известно, че спинът на пиона е равен на нула, на протона — на половина, а на Λ^0 — също на половина. Ние бихме искали да решим следната задача: да предположим, че частицата е родена така, че тя се оказва напълно поляризирана; това означава, че нейният спин е насочен, да речем, нагоре по отношение на подходящо подбрана ос z (фиг. 15.6, *а*). Въпросът се заключава в това да се намери с каква вероятност Λ^0-частицата се разпада така, че протонът да излита под ъгъл θ спрямо оста z (фиг. 15.6, *б*). С други думи, какво е ъгловото разпределение на радпадите? Ние ще разглеждаме разпада в координатната система, където Λ^0 е в покой, и ще измерваме ъглите в системата на покой на Λ^0; ако трябва, те винаги могат да бъдат приведени в друга система.

Ще започнем с разглеждането на частния случай, когато протонът се изпуска в малък телесен ъгъл $\Delta\Omega$ близко до оста z (фиг. 15.7). До разпада спинът на Λ^0 е насочен нагоре (фиг. 15.7, *а*). Миг след това (по причини, неизвестни и до ден днешен; известно е само, че те са свързани със слабите взаимодействия) Λ^0 се взривява, образувайки протон и пион. Нека протонът лети нагоре по оста $+z$. Тогава поради закона за запазване на импулса пионът е принуден да се насочи надолу. Тъй като протонът е частица със спин 1/2, неговият спин трябва да бъде насочен или нагоре, или надолу — по принцип има две възможности, показани на фиг. 15.7, *б* и *в*. Запазването на момента на количеството на движение изисква обаче спинът на протона да е насочен само нагоре. Това може да се разбере най-лесно от следните разсъждения. Частица, движеща се по оста z, не може по никакъв начин да добие момент около тази ос за сметка на своето движение, затова в J_z могат да имат дял само спиновете. Спиновият момент на количеството на движение около оста z до разпада е бил равен на $+\hbar/2$; значи и след разпада той трябва да е равен на $+\hbar/2$. Може да се каже, че поради това, че пионът няма спин, спинът на протона трябва да е насочен нагоре.

Ако вас ви тревожи това, че такъв род разсъждения могат да се окажат неправилни в квантовата механика, струва си да загубим минутка, за да покажем, че и според квантовата механика нещата стоят точно така. Началното (доразпадното) състояние, което ние означаваме с $|\Lambda^0$, спин по $+z\rangle$, има това свойство, че ако то бъде завъртяно около оста z на ъгъл φ, векторът на състоянието се умножава с фазов множител $e^{i\varphi/2}$. (В завъртяната система векторът на състоянието е равен на $e^{i\varphi/2}|\Lambda^0$, спинът по $+z\rangle$.) Именно това се има пред вид, когато се говори, че спинът на частица със спин 1/2 е насочен нагоре. Тъй като поведението на природата не може да зависи от нашия избор на координатните оси, крайното състояние на системата „протон плюс пион“ трябва да има същото свойство. Крайното състояние можем да запишем например във вида

$$|\text{протон лети по } +z, \text{ спин по } +z, \text{ пион лети по } -z\rangle.$$

Но движението на пиона всъщност може да не се уговаря, защото в избраната от нас система той винаги се движи противоположно на протона; нашето описание на крайното състояние може да се сведе до

$$|\text{протон лети по } +z, \text{ спин по } +z\rangle.$$

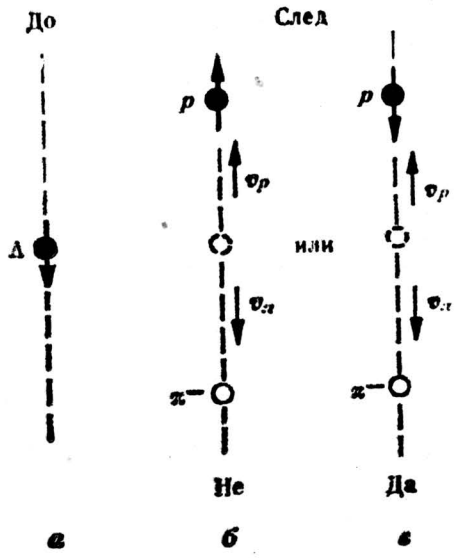
Какво ще се случи с това състояние, ако ние завъртим координатната система около оста z на ъгъл φ?

Щом протонът и пионът се движат по оста z, тяхното движение не се изменя при завъртването. (Ето защо ние избрахме този частен случай; иначе нашето разсъждение не би било валидно.) Значи и с пиона нищо няма да се случи, защото неговият спин е равен на нула. Спинът на протона обаче е равен на 1/2. Ако той е насочен нагоре, той в отговор на завъртването ще измени фазовия множител на състоянието с $e^{i\varphi/2}$ пъти. (Ако спинът беше на-

сочен надолу, изменението на фазата би се определило от $e^{\varphi i_2}$). Но ако моментът на количеството на движение се запазва (а това е така, понеже в хамилтониана няма фактори, зависещи от външните въздействия), изменението на фазата вследствие на завъртването трябва да бъде едно и също до и след разпада. И тъй единствената възможност се състои в това спинът на протона да бъде насочен нагоре. Ако електронът се движи нагоре, то и спинът му е насочен нагоре.

Ние следователно заключаваме, че запазването на момента на количеството на движение разрешава процеса, показан на фиг. 15.7, *б*, но не разрешава процеса, показан на фиг. 15.7, *в*. А щом ние знаем, че разпадът все пак се осъществява, значи има някаква амплитуда за процеса, показан на фиг. 15.7, *б*, когато протонът лети нагоре и спинът при това също е ориентиран нагоре. И ние означаваме с буква a амплитудата за това, че за безкрайно малък интервал от време ще се осъществи такъв разпад[1].

Сега да видим какво би се случило, ако спинът на Λ^0 първоначално е насочен надолу. Отново разглеждаме разпади, в които протонът лети нагоре по оста z, както е показано на фиг. 15.8. На вас, разбира се, сега ви е ясно, че в този случай спинът на протона е насочен надолу (стига само моментът на количеството на движение да се запазва). Да означим амплитудата на този разпад с буквата b.



Фиг. 15.8. Разпад по оста z на Λ^0 със спин, насочен надолу

За амплитудите a и b ние не можем да кажем нищо повече. Те зависят от вътрешната механика на частицата Λ^0 и от слабите разпади и никой не знае засега как те се пресмятат. Ето защо налага се те да бъдат определени опитно. Но като знаем само тези две амплитуди, ние *можем* да узнаем за ъгловото разпределение на разпада всичко, каквото поискаме. Трябва само да определяме винаги точно и пълно тези състояния, за които става дума.

Ние искаме да знаем вероятността за това, че протонът излиза под ъгъл θ спрямо оста z (в някакъв тесен телесен ъгъл $\Delta\Omega$) както е показано на фиг. 15.6. Да прекараме нова ос z в тази посока и да я означим с z'! Ние знаем как се анализира това, което става по тази ос. По отношение на нея спинът на Λ^0 вече не е насочен нагоре, а има някаква амплитуда за това той да се окаже насочен нагоре и някаква — надолу. Всичко това ние пресмятахме в гл. 4, а след това в гл. 8 [уравнение (8.30)]. Амплитудата за това, че спинът ще бъде насочен нагоре, е $\cos\theta/2$, а амплитудата за това, че той е насочен надолу, е $\sin\theta/2$[2]. Когато спинът на Λ^0 е насочен нагоре по оста z', тя ще изпусне протон по посока на $+z'$ с амплитуда a. Значи амплитудата за това, че в посоката $+z'$ ще премине протон със спин по $+z'$, е равна на

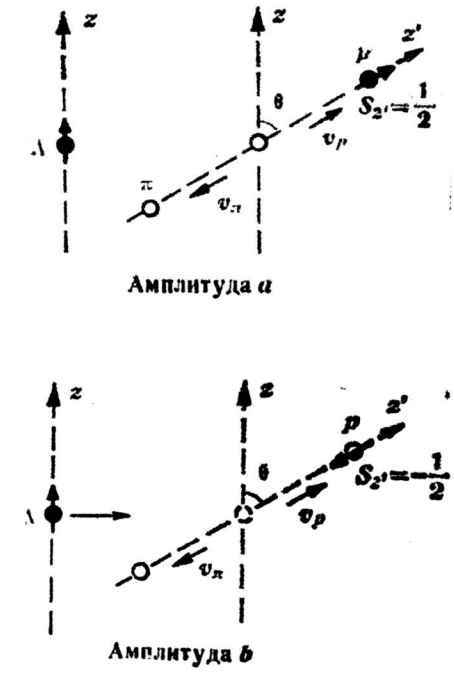
$$a\cos\theta/2. \tag{15.33}$$

По същия начин се показва, че амплитудата за това, че в посоката $+z'$ ще премине протон със спин по $-z'$, е равна на

$$-b\sin\theta/2. \tag{15.34}$$

Двата процеса, за които се отнасят тези амплитуди, са показани на фиг. 15.9.

Сега да си зададем такъв прост въпрос. Нека искаме да регистрираме протоните, излитащи под ъгъл θ, без да се интересуваме от техния спин. Двете спинови състояния (нагоре и надолу по оста z') са различими дори и да не желаем това. Значи, за да се получи вероятността, необходимо е амплитудите да се повдигнат в квадрат и да се съберат. Вероятността $f(\theta)$ да се открие протонът в малък телесен ъгъл $\Delta\Omega$ около θ е



Фиг. 15.9. Две възможни състояния на разпада $\Lambda^0 \to p + \pi^-$

[1] Ние предполагаме тук, че механизмът на квантовата механика ви е известен до такава степен, че за всичко можем да говорим на чисто физически език, без да губим време за изписване на всички математически подробности. Но ако това, което ние говорим тук, не ви е твърде ясно, обърнете се към приложението в края на параграфа, където са приведени някои недостигащи детайли.

[2] Ние прекарваме оста z' в равнината xz и използуваме матричните елементи за $R_y(\theta)$. Същото би се получило и при друг избор на осите.

$$f(\theta) = |a|^2 \cos^2\theta/2 + |b|^2 \sin^2\theta/2. \qquad (15.35)$$

Като си спомним, че $\sin^2\theta/2 = \frac{1}{2}(1-\cos\theta)$ и $\cos^2\theta/2 = \frac{1}{2}(1+\cos\theta)$, можем да запишем $f(\theta)$ така:

$$f(\theta) = \frac{|a|^2+|b|^2}{2} + \frac{|a|^2-|b|^2}{2}\cos\theta. \qquad (15.36)$$

Ъгловото разпределение има вид

$$f(\theta) = \beta(1+\alpha\cos\theta). \qquad (15.37)$$

Едната част на вероятността не зависи от θ, а другата зависи линейно от $\cos\theta$. От измерванията на ъгловото разпределение ние можем да намерим α и β, а следователно и $|a|$, и $|b|$.

Може да се получи отговор и на много други въпроси. Може би вас ви интересуват само тези протони, спиновете на които са насочени нагоре относно *старата* ос z? Всеки един от членовете (15.33) и (15.34) дава амплитудата за това, че спинът на протона ще се окаже насочен съответно нагоре или надолу по отношение на оста z' ($|+z'\rangle$ и $|-z'\rangle$). А състоянието, когато спинът е насочен нагоре относно старата ос, т. е. $|+z\rangle$, може да се изрази чрез двете базисни състояния $|+z'\rangle$ и $|-z'\rangle$. Тогава, умножавайки двете амплитуди (15.33) и (15.34) със съответните коефициенти ($\cos\theta/2$ и $\sin\theta/2$), получаваме пълната амплитуда

$$\left(a\cos^2\frac{\theta}{2} + b\sin^2\frac{\theta}{2}\right).$$

Нейният квадрат дава вероятността за това, че протонът ще излети под ъгъл θ със спин, ориентиран по посока на спина на Λ^0 (нагоре по оста z).

Ако четността се запазваше, бихме могли да изкажем още едно твърдение. Разпадът, представен на фиг. 15.8, просто е огледално отражение да речем в равнината yz на разпада, представен на фиг. 15.7 [1]. Ако четността се запазваше, b би се равнявало или на a, или на $-a$. Тогава коефициентът α в (15.37) би бил равен на нула и разпадът би се осъществявал еднакво често във всички посоки.

Резултатите от опитите говорят обаче, че при разпада има асиметрия. Измереното ъглово разпределение наистина се изменя по закона $\cos\theta$, както ние предсказахме, а не по закона $\cos^2\theta$ или по някаква друга степен на $\cos\theta$. От това ъглово разпределение следва, че спинът на Λ^0 е равен на 1/2. Освен това ние виждаме, че четността не се запазва. Наистина коефициентът α е намерен опитно и той е равен на $0{,}62 \pm 0{,}05$, така че b е приблизително два пъти по-голямо от a. Липсата на симетрия при отражения е съвсем очевидна.

Вие виждате колко много може да се извлече от закона за запазване на момента на количеството на движение. В следващата глава ще бъдат приведени още някои примери за това.

● ● ●

Забележка след лекцията. Под амплитудата a тук ние подразбираме това, че състоянието |протон лети по $+z$, спин по $+z\rangle$ е образувано за безкрайно малко време dt от състоянието $|\Lambda^0$, спин по $+z\rangle$, или, с други думи, че

$$\langle\text{протон лети по } +z, \text{ спин } +z|\,H\,|\,\Lambda^0, \text{ спин по } +z\rangle = i\hbar a, \qquad (15.38)$$

където H е хамилтонианът на целия свят, или поне онази негова част, благодарение на която се осъществява Λ-разпадът. Запазването на момента на количеството на движение означава, че

[1] Спомнете си, че спинът е аксиален вектор и при отражение той се преобръща.

хамилтонианът трябва да има свойството:

$$<\text{протон лети по } +z, \text{ спин по } -z \mid H \mid \Lambda^0, \text{ спин по } +z> = 0. \quad (15.39)$$

Под амплитудата b се разбира, че

$$<\text{протон лети по } +z, \text{ спин по } -z \mid H \mid \Lambda^0, \text{ спин по } -z> = ihb. \quad (15.40)$$

Запазването на момента на количеството на движение предполага, че

$$<\text{протон лети по } +z, \text{ спин по } +z \mid H \mid \Lambda^0, \text{ спин по } -z> = 0. \quad (15.41)$$

Ако не е ясно как са написани амплитудите (13.33) и (15.34), ние можем да ги изразим математически по следния начин. Когато писахме (15.33) на нас ни трябваше амплитудата за това, че Λ^0 със спин, насочен по $+z$, се разпада на протон, който се движи по оста $+z'$ със спин, насочен също по $+z'$, т. е.

$$<\text{протон лети по } +z', \text{ спин по } +z' \mid H \mid \Lambda^0, \text{ спин по } +z>. \quad (15.42)$$

Въз основа на теоремите на квантовата механика тази амплитуда може да се запише така:

$$\sum_i <\text{протон лети по } +z', \text{ спин по } +z' \mid H \mid \Lambda^0, i><\Lambda^0, i \mid \Lambda^0, \text{ спин по } +z>, \quad (15.43)$$

където сумирането се провежда по базисните състояния $\mid \Lambda^0, i>$ на Λ^0-частицата в покой. Тъй като спинът на Λ^0-частицата е равен на 1/2, тези състояния са две, в какъвто и базис да работим. Ако за базисни изберем състоянията със спин, насочен нагоре и надолу *по отношение на оста* z' ($\mid +z'>$, $\mid -z'>$), амплитудата (15.43) ще бъде равна на сумата

$$<\text{протон лети по } +z', \text{ спин по } +z' \mid H \mid \Lambda^0, +z'> \times <\Lambda^0, +z' \mid \Lambda^0, +z> + <\text{протон лети по } +z', \text{ спин по } +z' \mid H \mid \Lambda^0, -z'><\Lambda^0, -z' \mid \Lambda^0, +z>. \quad (15.44)$$

Първият множител в първото събираемо е равен на a [от (15.38)], а първият множител във второто събираемо е равен на нула — от формула (25.41), която на свой ред следва от закона за запазване момента на количеството на движение. Вторият множител $<\Lambda^0, +z' \mid \Lambda^0, +z>$ в първото събираемо е точно амплитудата за това, че частицата Λ^0 със спин 1/2, насочен нагоре по една ос, ще има спин, насочен нагоре по друга ос, завъртяна относно първата на ъгъл θ. Тази амплитуда е равна на $\cos\frac{\theta}{2}$ [вж. табл. (4.2)]. Така че (15.44) е равно просто на $a\cos\frac{\theta}{2}$, както е и според (15.33). Амплитудата (15.34) следва от аналогични разсъждения за Λ^0-частица със спин, насочен надолу.

● ● ●

15-6. Резюме на матриците на въртене

Сега ние искаме да съберем на едно място всичко, което знаем за поведението при въртене на частиците със спин $^1/_2$ и спин 1; това ще бъде удобно за по-нататъшното изложение. Тук вие ще намерите таблици на двете матрици на въртене $R_z(\varphi)$ и $R_y(\theta)$ за частици със спин $^1/_2$, за частици със спин 1 и за фотоните (частици със спин 1 и нулева маса). За всяка от тях са дадени елементите $<j \mid R \mid i>$ на матрицата на въртене около оста z или оста y. Те, разбира се, са напълно еквивалентни на амплитудите от вида $<+T \mid OS>$, които ние използувахме в предходните глави. Под $R_z(\varphi)$ ние разбираме, че се взема

Таблица 15.1

Матрица на въртене за спин $^1/_2$

Две състояния: $\mid +>$, нагоре по оста z, $m = +^1/_2$
$\mid ->$, надолу по оста z, $m = -^1/_2$

$R_z(\varphi)$	$\mid +>$	$\mid ->$
$<+\mid$	$e^{+i\varphi/2}$	0
$<-\mid$	0	$e^{-i\varphi/2}$

$R_y(\theta)$	$\mid +>$	$\mid ->$
$<+\mid$	$\cos\theta/2$	$\sin\theta/2$
$<-\mid$	$-\sin\theta/2$	$\cos\theta/2$

Таблица 15.2

Матрица на въртене за спин 1

Три състояния: $|+>,\ m=+1$
$|0>,\ m=0$
$|->,\ m=-1$

$R_z(\varphi)$	$\|+>$	$\|0>$	$\|->$
$<+\|$	$e^{i\varphi}$	0	0
$<0\|$	0	1	0
$<-\|$	0	0	$e^{-i\varphi}$

$R_y(\theta)$	$\|+>$	$\|0>$	$\|->$
$<+\|$	$\frac{1}{2}(1+\cos\theta)$	$+\frac{1}{\sqrt{2}}\sin 0$	$\frac{1}{2}(1-\cos\theta)$
$<0\|$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta$	$\cos 0$	$+\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta$
$<-\|$	$\frac{1}{2}(1-\cos\theta)$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta$	$\frac{1}{2}(1+\cos\theta)$

Таблица 15.3

Фотони

Две състояния:

$$|R>=\frac{1}{\sqrt{2}}(|x>+i|y>),m=+1$$

(дяснополяризирани)

$$|L>=\frac{1}{\sqrt{2}}(|x>-i|y>),\ m=-1$$

(лявополяризирани)

$R_z(\varphi)$	$\|R>$	$\|L>$
$<R\|$	$e^{i\varphi}$	0
$<L\|$	0	$e^{-i\varphi}$

проекцията на състоянието в новата координатна система, завъртяна на ъгъл φ около оста z, при което за определяне посоката на завъртването винаги се използува правилото на дясната ръка $R_y(\theta)$ означава, че координатните оси са завъртени на ъгъл θ около оста y. Като знаете тези два типа матрици на въртене, вие лесно можете да пресметнете матрицата на всяко въртене. Както обикновено, матричният елемент се пише така, че състоянието *отляво* е базисното състояние на *новата* (завъртяната) система, а състоянието *отдясно* е базисното състояние на *старата* (незавъртяната) система. Клетките на таблицата може да се тълкуват различно. Например клетката $e^{-i\varphi/2}$ в табл. 15.1 означава, че матричният елемент $<-|R|->=e^{-i\varphi/2}$. Но последното означава още, че $\widehat{R}|->=e^{-i\varphi/2}|->$ или че $<-|\widehat{R}=<-|e^{-i\varphi/2}$. Това са все еднакви неща.

16

Момент на количеството на движение

16-1. Електрично диполно излъчване

а

В предната глава ние развихме идеите за запазване моменте на количеството на движение в квантовата механика и показахмкак те могат да се използуват за предсказване на ъгловото раз пределение на протоните при разпада на Λ^0-частицата. Сега ние искаме да добавим още няколко илюстрации на тези следствия, които произтичат от запазването на момента на количеството на движение на атомните системи. Като първи пример ще послужи излъчването на светлина от атом. Запазването на момента на количеството на движение (заедно с други обстоятелства) определя поляризацията и ъгловото разпределение на излъчваните фотони.

Нека имаме атом във възбудено състояние с определен момент на количеството на движение, да речем със спин, равен на 1; излъчвайки фотон, атомът преминава в състояние с момент, равен на нула, и с по-ниска енергия. Задачата е да се намерят ъгловото разпределение и поляризацията на фотоните. (Тя е много подобна на задачата за разпада на Λ^0-частицата, но сега спинът е равен не на 1/2, а на 1./ Щом възбуденото състояние има спин единица, за z-компонента на момента има три възможности. Стойностите на m могат да бъдат или $+1$, или 0, или -1. Да вземем например $m=+1$. (Ако ние разберем този случай, ще се справим и с другите.) Да предположим, че моментът на количеството на движение на атома е насочен по оста $+z$ (фиг. 16.1,*а*) и да се запитаме каква е амплитудата за това, че той ще излъчи нагоре по оста z кръгово дяснополяризирана светлина, така че вследствие на това неговият момент ще стане равен на нула (фиг. 16.1, *б*). Ние не знаем отговора на този въпрос. Но затова знаем, че дяснополяризираната по кръг светлина носи по посока на разпространението си една единица момент на количеството на движение. Следователно след излъчването на фотона положението е такова, като показаното на фиг. 16.1, *б* т. е. атомът е останал с нулев момент относно оста z, тъй като ние предположихме, че най-ниското състояние на атома има нулев спин. Да означим амплитудата на това събитие с a. По-точно, a ще означава амплитудата за излъчване на фотона в някакъв тесен телесен ъгъл $\Delta\Omega$, обхващащ оста z за време dt. Забележете, че амплитудата за излъчване на ляв фотон в същата посока е равна на нула. За такъв фотон моментът относно оста z би бил равен на -1, а тъй като за атома той е равен на нула, сумарно би се получило -1, така че моментът не би се запазвал в случая.

По същите причини, ако спинът на атома в началото е насочен надолу (-1 по оста z), той може да излъчва по посока на оста $+z$ само леви фотони (фиг. 16.2). Амплитудата на такова събитие означаваме с буква b (отново имайки пред вид амплитудата за излъчване на фотона в някакъв тесен ъгъл $\Delta\Omega$). От друга страна, ако атомът се намира в състояние с $m=0$, той въобще не може да изпусне фотон в посоката $+z$, тъй като фотонът може да има момент на количеството на движение относно своята посока на разпространение само $+1$ или -1.

По-нататък може да се покаже, че b и a са свързани. Да извършим операцията инверсия над системата, представена на фиг. 16.1. Това означава, че ние трябва да си представим как ще изглежда системата, ако преместим всяка нейна част в съответното ѝ положение от другата страна на координатното начало. Но това не значи, че трябва да се отразяват и векторните на момен-

16-1. Електрично диполно излъчване

16-2. Разсейване на светлина

16-3. Анихилация на позитроння

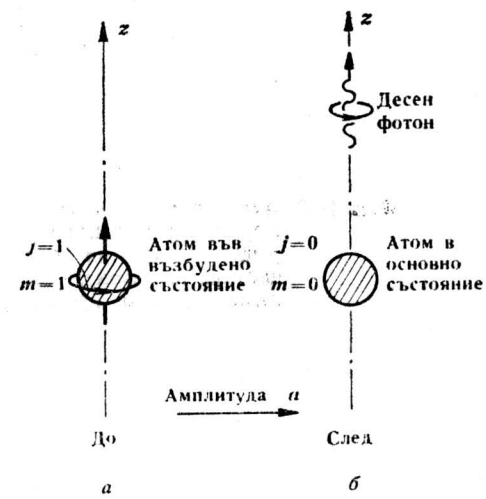
16-4. Матрица на въртене за произволен спин

16-5. Измерване на ядрения спин

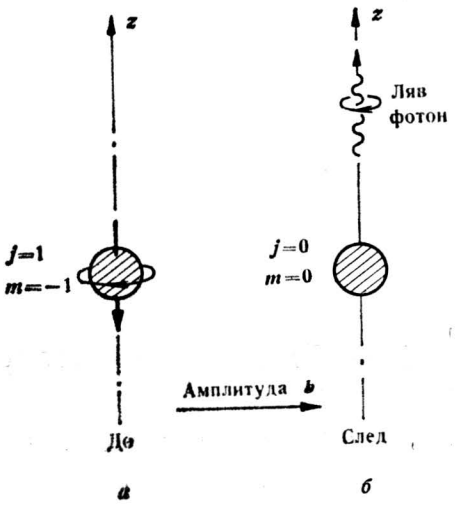
16-6. Събиране на моментите на количеството на движение

Приложение 1. Извод на матриците на въртене

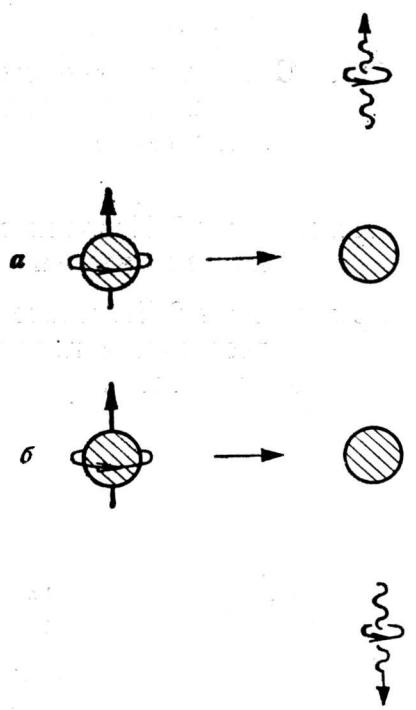
Приложение 2. Запазване на четността при излъчване на фотона



Фиг. 16.1. Атом с $m=+1$ излъчва по оста $+z$ десен фотон



Фиг. 16.2. Атом с $m=-1$ излъчва по оста $+z$ ляв фотон



Фиг. 16.3. Ако процесът (*а*) се трансформира с помощта на операцията инверсия относно центъра на атома, той ще изглежда като процеса (*б*)

та на количеството на движение; нали те са изкуствени образования. Нужно е друго—трябва да се обърне истинският характер на движението, което съответствува на такъв момент на количеството на движение.

На фиг. 16.3, *а* ние показваме как изглежда процесът, представен на фиг. 16.1, до и след инверсията относно центъра на атома. Забележете, че посоката на въртене на атома не се изменя[1]. В обърнатата система (фиг. 16.3, *б*) се получава атом с $m=+1$, излъчващ надолу ляв фотон.

Ако ние сега завъртим системата, представена на фиг.16.3,*б* на 180° около осите x и y, тя ще съвпадне с фиг.16.2. Съчетаването на инверсията и въртенето превръща втория процес в първия. Използувайки табл.15.2 (стр. 160), ние виждаме, че завъртането на 180° около оста y превръща състоянието с $m=-1$ точно в състоянието с $m=+1$, така че амплитудата b трябва да бъде равна на амплитудата a , *ако не се смята възможната промяна на знака при инверсията.* А промяната на знака при инверсия зависи от четностите на началното и крайното състояния на атома.

В атомните процеси четността се запазва, така че четността на цялата система до и след излъчването на фотона трябва да бъде една и съща. Какво всъщност ще стане зависи от това, положителни или отрицателни са четностите на началното и крайното състояние на атома —в различните случаи ъгловото разпределение на лъчението ще бъде различно. Да вземем обикновения случай: *отрицателна* четност на началното състояние на атома и *положителна* четност на крайното; той дава така нареченото „електрично диполно излъчване“.(Ако началното и крайното състояния имат една и съща четност, казваме, че има място „магнитно диполно излъчване“, напомнящо по характер излъчването на намотка, по която тече променлив ток.) Ако четността на началното състояние е отрицателна, неговата амплитуда изменя своя знак при инверсия, която превръща системата *а* в *б* на фиг.16.3. Крайното състояние на атома има положителна четност, така че неговата амплитуда не изменя своя знак при инверсия. Ако в реакцията четността се запазва, амплитудата b трябва да е равна на амплитудата a по големина, но да има противоположен знак.

Ние стигаме до заключението, че ако амплитудата за това, че състоянието $m=+1$ излъчва фотон напред е равна на a, за разглежданите четности на началното и крайно състояние, амплитудата за това, че състоянието $m=-1$ ще излъчи напред ляв фотон[2], е равна на $-a$.

Сега ние имаме всичко, за да намерим амплитудата за това, че фотонът ще бъде изпуснат под ъгъл θ към оста z. Нека атомът в началото да е поляризиран така, че $m=+1$. Ние можем да разложим това състояние на състояния с $m=+1,0,-1$ относно новата ос z', проведена по посока на излъчването на фотона. Амплитудите на тези три състояния са точно приведените в долната половина на табл. 15.2 (стр. 160). Амплитудата за това, че десният фотон се изпуска в посока под ъгъл θ тогава е равна на произведението на a и амплитудата за това, че в тази посока ще има състояние с $m=+1$, а именно

$$a<+ \mid R_y(\theta) \mid +>=\frac{a}{2}(1+\cos\theta). \qquad (16.1)$$

Амплитудата за това, че в същата посока ще бъде изпуснат ляв

[1] Когато ние преминаваме от x, y, z към $-x, -y, -z$ може да се помисли, че всички вектори се преобръщат. Това е вярно за *полярните* вектори подобни на преместванията и скоростите, но не и за *аксиалните* вектори, каквито са моментът на количеството на движение и всички вектори, представляващи векторно произведение на два полярни вектора. Компонентите, на аксиалните вектори при инверсия не се изменят.

[2] Някой може да възрази, че всичките тези разсъждения са неверни, тъй като нашите крайни състояния нямат определена четност. В приложение 2 на края на тази глава вие ще намерите друго доказателство, което ще ви удовлетвори.

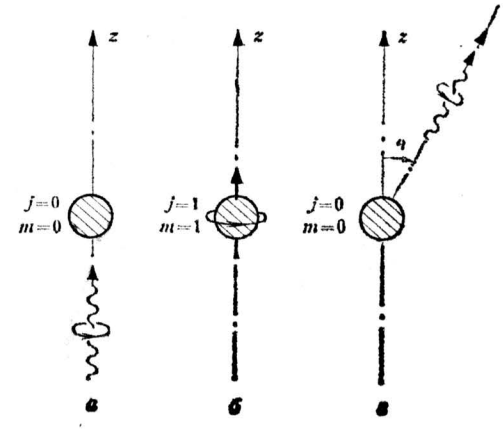
фотон, е равна на произведението на $-a$ и амплитудата за това, че в новата посока ще има състояние с $m=-1$. От табл. 15.2, следва

$$-a<-\mid R_y(\theta)\mid +>=\frac{a}{-2}(1-\cos\theta). \qquad (16.2)$$

Ако ви интересуват други поляризации, вие ще получите техните амплитуди чрез суперпозиция на тези две амплитуди. За да получите интензивността на всяка компонента като функция на ъгъла, трябва да вземете квадрата на модула на амплитудите.

16-2. Разсейване на светлината

Ще се възползуваме от тези резултати, за да решим една малко по-сложна задача, която обаче е по-близка до реалността. Да предположим, че същите атоми се намират в основно състояние ($j=0$) и *разсейват* падащ върху тях светлинен сноп. Нека светлината първоначално се разпространява по посока на $+z$, така че фотоните летят към атома от посоката $-z$, както е показано на фиг. 16.4, *а*. Разсейването на светлината може да се разглежда като процес, който се осъществява на два етапа: фотонът най-напред се поглъща, а след това отново се излъчва. Ако ние започнем с десен фотон (фиг. 16.4, *а*) и ако моментът на количеството на движение се запазва, след поглъщането атомът ще се окаже в състояние с $m=+1$ (фиг. 16.4, *б*). Амплитудата на този процес ще означим с c. След това атомът може да изпусне десен фотон под ъгъл θ (фиг. 16.4, *в*). Пълната амплитуда за това, че десният фотон ще се разсее под ъгъл θ, е равна просто на произведението на c с амплитудата (16.1). Ако тази амплитуда означим с $<R'\mid S\mid R>$, имаме



Фиг. 16.4. Разсейване на светлина от атом, разглеждано като процес, който протича на два етапа

$$<R'\mid S\mid R>=\frac{ac}{2}(1+\cos\theta). \qquad (16.3)$$

Има също определена амплитуда за това да се погълне десен фотон, а да се излъчи ляв. Произведението на двете амплитуди е $<L'\mid S\mid R>$ — амплитудата за това, че десният фотон се превръща в ляв след разсейването. Използувайки (16.2), имаме

$$<L'\mid S\mid R>=-\frac{ac}{2}(1-\cos\theta). \qquad (16.4)$$

Сега да видим какво става, ако на атома пада ляв фотон. Когато той се поглъща, атомът сам преминава в състояние с $m=-1$. Разсъждавайки така, както в предходния параграф, можем да покажем, че амплитудата ще бъде равна на $-c$. Амплитудата за това, че атомът в състояние с $m=-1$ ще изпусне десен фотон под ъгъл θ, е равна на произведението на a с амплитудата $<+\mid R_y(\theta)->$, която е $1/2\ (1-\cos\theta)$. В крайна сметка получаваме

$$<R'\mid S\mid L>=-\frac{ac}{2}(1-\cos\theta). \qquad (16.5)$$

На края амплитудата за това, че ляв фотон след разсейването остава ляв, е

$$<L'\mid S\mid L>=\frac{ac}{2}(1+\cos\theta). \qquad (16.6)$$

(Тук има два минуса, които се унищожават.)

Ако измерваме *интензивността* на разсейването за всяка дадена комбинация от кръгови поляризации, тя ще бъде пропорционална на квадрата на една от четирите амплитуди. Например, ако пада дясно-поляризиран сноп светлина, интензивността на дясно-поляризираната светлина в разсеяния сноп на лъчението ще се мени с θ, като $(1+\cos\theta)^2$.

Всичко това е прекрасно, но да допуснем, че бихме искали да разсейваме *линейно* поляризирана светлина. Какво би могло да

се очаква тогава? Ако светлината е поляризирана по оста x, тя може да се представи като суперпозиция на дясно- и лявополяризирана по кръг светлина. Ние пишем (вж. гл. 9, §4)

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|R\rangle + |L\rangle). \tag{16.7}$$

Или ако светлината е поляризирана по оста y,

$$|y\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}}(|R\rangle - |L\rangle). \tag{16.8}$$

Какво искате сега да знаете? Искате да знаете амплитудата за това, че поляризираният по x фотон се разсейва под ъгъл θ като десен фотон? Моля. Приложете за тази цел обикновеното правило за комбиниране на амплитудите. Най-напред умножете (16.7) с $\langle R' \mid S$. Вие получавате

$$\langle R' \mid S \mid x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[\langle R' \mid S \mid R\rangle + \langle R' \mid S \mid L\rangle]. \tag{16.9}$$

Сега заместете тук (16.3) и (16.5). Ще се получи

$$\langle R' \mid S \mid x\rangle = \frac{ac}{\sqrt{2}} \cos\theta. \tag{16.10}$$

Ако вие бихте искали да знаете амплитудата за това, че фотонът, поляризиран по оста x, се разсейва като ляв фотон, то бихте получили

$$\langle L' \mid S \mid x\rangle = \frac{ac}{\sqrt{2}} \cos\theta. \tag{16.11}$$

На края да си представим, че вас ви е интересувала амплитудата за това, че поляризиран по x фотон се разсейва, като запазва своята поляризация неизменна. Значи на вас ви трябва да знаете $\langle x' \mid S \mid x\rangle$. Това може да се запише така

$$\langle x' \mid S \mid x\rangle = \langle x' \mid R'\rangle\langle R' \mid S \mid x\rangle + \\ + \langle x' \mid L'\rangle\langle L' \mid S \mid x\rangle. \tag{16.12}$$

Ако вие след това използувате релациите

$$|R'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x'\rangle + i\,|y'\rangle), \tag{16.13}$$

$$|L'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|x'\rangle - i\,|y'\rangle), \tag{16.14}$$

от тях следва, че

$$\langle x' \mid R'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \tag{16.15}$$

$$\langle x' \mid L'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{16.16}$$

Така вие получавате

$$\langle x' \mid S \mid x\rangle = ac\cos\theta. \tag{16.17}$$

Отговорът следователно се състои в това, че сноп поляризирана по оста x светлина се разсейва под ъгъл θ (в равнината xz) с *интензивност*, пропорционална на $\cos^2\theta$. Ако вие питате за поляризираната по оста y светлина, то

$$\langle y' \mid S \mid x\rangle = 0. \tag{16.18}$$

Така разсеяната светлина е напълно поляризирана по оста x.

Тук виждаме нещо интересно. Формулите (16.17) и (16.18) точно съответствуват на класическата теория за разсейване на светлината, която ние изложихме в гл. 32, § 5 (т.I), считайки, че електронът е свързан с атома чрез линейна хармонична сила, и

че той действува като класически осцилатор. Вие може да помислите: „А в класическата теория всичко беше къде по-просто; ако тя дава верен отговор, защо да си пълним главите с квантова теория?“ Първо, ние за сега разгледахме само един частен(макар и често срещан) случай на атом във възбудено състояние с $j=1$ и в основно състояние с $j=0$. Ако възбуденото състояние би имало спин, равен на 2, вие бихте получили вече други резултати. Второ, няма причини, поради които моделът с електрон, закрепен на пружина и привеждан в движение от трептящо електрично поле, може да се приеме за верен и за единичен фотон. Наистина ние видяхме, че той все пак е верен и че интензитетът и поляризацията се оказват, каквито трябва. Така че в известен смисъл ние сме лавирали някъде недалеч от истината в течение на нашия курс. В началото на курса ние излагахме теорията на показателя на пречупване и разсейване на светлината, опирайки се на класически представи. А сега ние показахме, че квантовата теория в най-обикновените случаи води към същия резултат. Ние фактически току-що обяснихме такова например явление като поляризация на дневна светлина с помощта на квантовомеханични разсъждения, а това е единственият наистина законен път.

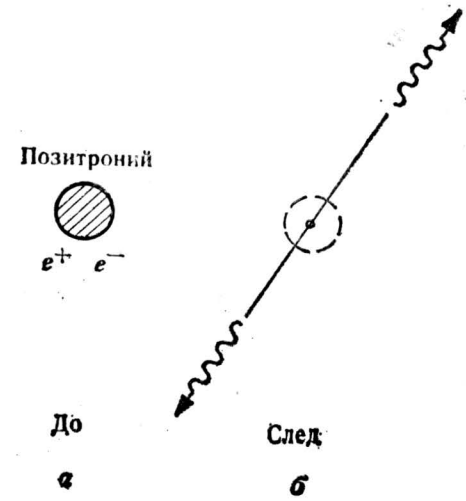
Въобще всички разпространени днес класически теории трябва да бъдат в крайна сметка потвърдени от единствено правилните квантови аргументи. Естествено е, че всички онези неща, за обяснението на които загубихме по-рано толкова време, бяха подбрани точно от тези части на класическата физика, които се потвърждават от квантовата механика. Забележете, че ние не обсъждахме детайлно такива модели на атома, в които електроните се движат около ядрата по орбити, защото такива модели не дават съгласуващи се с квантовата механика резултати. Но електрон на пружина (въпреки че тази картина съвсем не прилича на атом) наистина се съгласува с нея и затова ние приехме този модел в теорията на показателя на пречупване.

16-3. Анихилация на позитрония

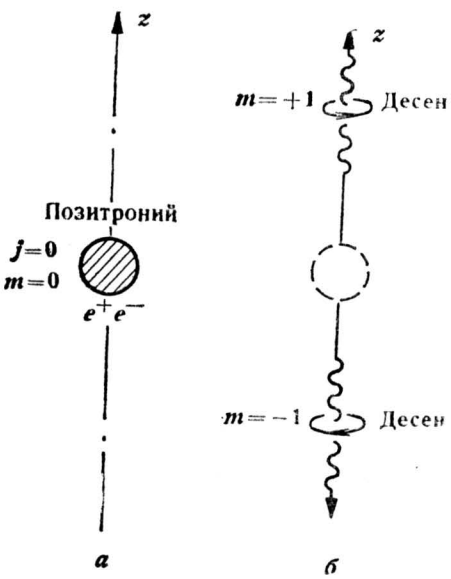
Сега бихме искали да разгледаме още един интересен пример Той е много привлекателен, макар и малко сложен, но да се надяваме, че не твърде. Нашият пример е системата, наричана *позитроний*, т.е. „атом“, съставен от електрон и позитрон — свързано състояние на e^+ и e^-.Той прилича на атома на водорода, само че вместо протон в него стои позитрон. Както и водородния атом, той има много състояния. И също както при водорода, основното състояние се разцепва на „свръхтънка структура“ вследствие на взаимодействието на магнитните моменти. Спиновете на електрона и позитрона са равни на 1/2 и могат да бъдат или паралелни, или антипаралелни на произволна фиксирана ос. (В основното състояние орбиталното движение не създава свой момент на количеството на движение.) И тъй имаме всичко четири състояния: три от тях са подсъстоянията на система със спин 1, всички с еднаква енергия; и едно състояние със спин нула и друга, различна енергия. Обаче разцепването на нивата тук е много по-силно от онези 1420MHz, които имаме в спектъра на водорода, защото магнитният момент на позитрона е много по-голям — 1000 пъти — от момента на протона.

Но най-важното различие е в това, че позитроният не може да съществува вечно. Позитронът е античастица на електрона; те могат взаимно да се унищожават. Двете частици изчезват напълно, превръщайки своята енергия на покой в лъчение под формата на γ—кванти (фотони). Двете частици с крайна маса на покой преминават в двойка (а може и повече) частици с нулева маса на покой[1].

[1] При нашето днешно дълбоко разбиране на света не е лесно да се отговори на въпроса — по-малко „материална“ ли е енергията на фотона, отколкото енергията на електрона? — нали, както вие помните, всички частици имат много сходно поведение. Единственото различие е в това, че фотонът няма маса на покой.



Фиг. 16.5. Двуфотонна анихилация на позитрония



Фиг. 16.6. Една от възможностите за анихилация на позитрония по оста z

Ще започнем с анализ на разпада на състоянието на позитрония със спин нула. Той се разпада на два γ—кванта за време 10^{-10} сек. В началото имаме позитрон и електрон с антипаралелни спинове, разположени много близко един до друг и образуващи системата позитроний. След разпада възникват два фотона, разлитащи се с равни и противоположни импулси (фиг. 16.5). Импулсите трябва да бъдат равни и противоположни, защото пълният импулс след разпада трябва да бъде такъв, какъвто е до разпада, т.е. равен на нула (ако ние разглеждаме анихилация на позитроний в покой). Ако позитроният се движи, ние можем да го догоним, да решим задачата и след това всичко да трансформираме обратно към лабораторната система (ето, виждате ли, сега ние умеем всичко; всичко, което ни трябва, ни е под ръка).

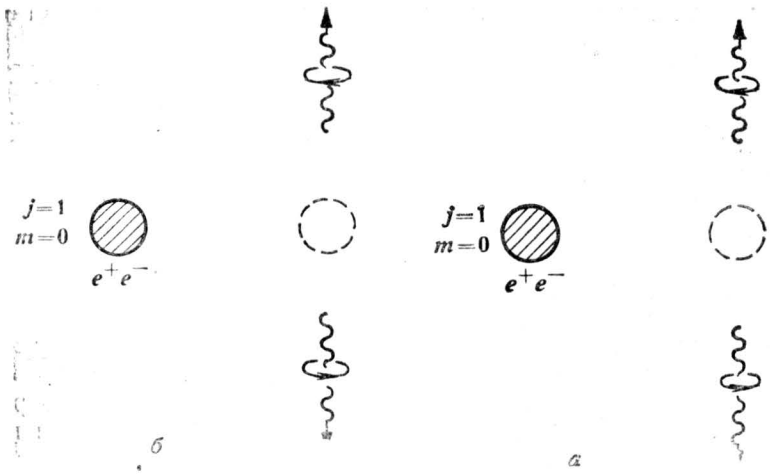
Да кажем още отначало, че ъгловото разпределение не представлява интерес. Щом спинът на началното състояние е равен на нула, няма никаква отделена ос, то е симетрично относно произволно въртене. Следователно и крайното състояние трябва да бъде симетрично относно всяко въртене. Това означава, че всички ъгли на разпад са еднакво вероятни — амплитудата за излитане на фотона в коя да е посока е една и съща. Разбира се, ако *един* от фотоните излита в дадена посока, *другият* излита в противоположна посока.

Единственото нещо, което ни остава, е да разгледаме поляризацията на фотоните. Да прекараме оста $+z$ по посока на движението на втория фотон. За описание на състоянието на поляризация на фотоните можем да използуваме кое да е представяне. Ние ще изберем дясната и лявата кръгова поляризация, които винаги ще определяме спрямо посоката на разпространение. Веднага се вижда, че ако движещият се нагоре фотон е дясно-поляризиран, моментът на количеството на движението ще остане предишния, ако фотонът, движещ се надолу също тъй се окаже дяснополяризиран. Всеки ще отнесе спин $+1$ на (момента) *относно посоката на своя импулс*[1], което означава $+1$ и -1 относно оста z. Сумата е равна на нула и моментът на количеството на движение след разпада ще се окаже такъв, какъвто и до разпада (фиг. 16.6).

Същите разсъждения показват, че ако движещият се нагоре фотон е десен, движещият се надолу не може да бъде ляв. Нали в такъв случай крайното състояние би имало две единици момент на количеството на движение. А това не се разрешава, ако спинът на началното състояние е равен на нула. Забележете, че такова крайно състояние е невъзможно и тогава, когато основното състояние на позитрония има спин 1, тъй като в този случай максималната големина на момента на количеството на движение в коя да е посока е равна на единица.

А сега ние ще покажем, че двуфотонната анихилация на състоянието със спин 1 е въобще невъзможна. Би могло да се стори, че това не е така, че ако вземем състояние с $j=1$, $m=0$, чийто момент на количеството на движение относно оста z е равен на нула, то ще прилича на състояние със спин 0 и затова може да се разпадне на два десни фотона. Разбира се, представеният на фиг. 16.7, *а* разпад запазва момента на количеството на движение относно оста z. Но да видим какво ще стане, ако ние завъртим тази система около оста y на ъгъл 180°; ще се получи това, което е показано на фиг. 16.7, *б*, т. е. конфигурация, точно съвпадаща с фиг. 16.7, *а*. Разменили са си местата двата фотона и повече нищо. А нали фотоните — това са бозе-частици; разменянето

1 Забележете, че ние винаги анализираме момента на количеството на движението относно посоката на движението на частицата. Ако започнем да се интересуваме от момента на количеството на движение относно други оси, би ни се наложило да вземем под внимание възможността за наличие на „орбитален" момент на количеството на движение, т. е. член от вида $\mathbf{p}\times\mathbf{r}$. Така ние нямаме право да говорим, че винаги фотоните излитат направо от центъра на позитрония. Те биха могли да излетят като две топчета от края на въртящо се колело. Ако оста се прекара по посока на движението, за такива подробности може да не се замисляме.



Фиг. 16.7. За състоянието на позитрония с $j=1$ процесът ($а$) и процесът ($б$), който се получава от ($а$) чрез завъртане около оста y на 180°, напълно съвпадат

на местата (транспонирането) на две частици не изменя знака на амплитудата, така че амплитудата за разпад на конфигурацията, показана на фиг. 16.7, *б*, трябва да бъде същата, както за конфигурацията на фиг. 16.7, *а*. Но ние предположихме, че спинът на началния обект е равен на единица. А когато завъртваме обект със спин 1 в състояние с $m=0$ на 180° около оста y, неговата амплитуда изменя своя знак (вж. табл. 15.2 за $\theta=\pi$, стр. 160). Следователно амплитудите на двете конфигурации, представени на фиг. 16.7, трябва да имат обратни знаци; частица със спин 1 *не може да се разпада на два фотона.*

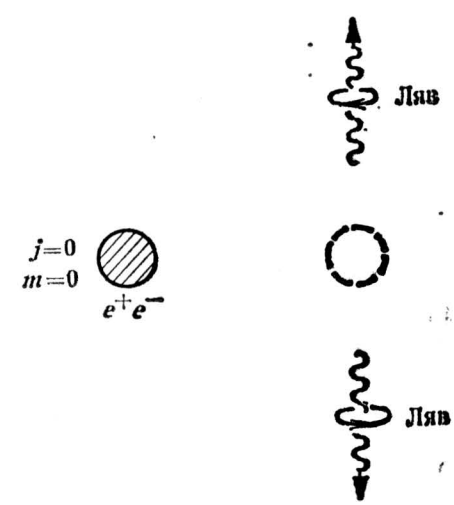
Когато се образува позитроний, може да се очаква, че в продължение на 1/4 от времето се получава позитроний в състояние със спин 0 и в продължение на 3/4 от времето — в състояние със спин 1 (с $m=-1$, 0 или $+1$). Така че в продължение на 1/4 от времето ще се осъществява двуфотонна анихилация. Останалите 3/4 от времето двуфотонната анихилация не може да се осъществява. Анихилацията има място, но се раждат *три* фотона. Такава анихилация по-трудно се дочаква и времето на живот се получава 1000 пъти по-дълго — около 10^{-7} *s*. Това се наблюдава опитно. Ние няма да се занимаваме по-подробно с анихилация на състоянието със спин 1.

Досега, опирайки се само на запазването на момента на количеството на движение, ние видяхме, че състоянието на позитрония със спин нула може да се превърне в два десни фотона. Има и друга възможност. Това състояние може да се превърне в двойка леви фотони, както е показано на фиг. 16.8. Следващият въпрос — какво е съотношението между амплитудите на тези два типа разпад? Това може да се узнае, като се вземе под внимание запазването на четността.

Но за това ние трябва да знаем четността на позитрония. Физиците—теоретици са показали по твърде сложен начин, който не може да се поясни лесно, че четностите на електрона и позитрона (неговата античастица) трябва да бъдат противоположни, така че основното състояние на позитрония със спин 0 има непременно отрицателна четност. Ние просто ще предположим, че четността е отрицателна и тъй като получаваме съгласие с експеримента, ще приемем това за достатъчно убедителен довод.

Да видим какво ще стане с процеса, представен на фиг. 16.6, ако извършим операцията инверсия. При инверсия всеки фотон изменя посоките на своето движение и поляризация. Обърнатата картина изглежда така, както показаната на фиг. 16.8. Ако считаме, че четността на позитрония е отрицателна, амплитудите на процесите на фиг. 16.6 и 16.8 трябва да имат обратни знаци. Нека $|R_1R_2\rangle$ е крайното състояние на фиг. 16.6, където двата фотона са десни, а $|L_1L_2\rangle$ е крайното състояние на фиг. 16.8, където двата фотона са леви. Истинското крайно състояние (да го означим с $|F\rangle$) трябва да бъде такова:

$$|F\rangle = |R_1R_2\rangle - |L_1L_2\rangle. \qquad (16.19)$$



Фиг. 16.8. Друг възможен процес на анихилация на позитрония

Тогава инверсията разменя местата на всички $|R>$ с местата на всички $|L>$ и води до състоянието

$$P\,|F>=|L_1L_2>-|R_1R_2>=|-F>, \qquad (16.20)$$

което се различава по знак от състоянието (16.19). Значи крайното състояние $|F>$ има отрицателна четност, съвпадаща с четността на първоначалното състояние на позитрония със спин 0. Това е единственото крайно състояние, което запазва и момента на количеството на движение и четността. Може, разбира се, да се пресметне амплитудата за това, че при разпад ще се получи това състояние, но ние няма да се занимаваме с това; нас сега ни интересува само поляризацията.

Какво означава физически състоянието (16.19)? Един от изводите е такъв: ако ние наблюдаваме фотонната двойка с помощта на два детектора, които могат независимо да регистрират броя на левите или броя на десните фотони, ние винаги ще наблюдаваме едновременно или двойка леви, или двойка десни фотони. С други думи, ако вие застанете от едната страна на позитрония, а вашият приятел — от другата, вие ще можете да кажете на вашия приятел, каква е поляризацията на фотона, излитащ към него. С вероятност 50 % вие ще регистрирате ту ляв, ту десен фотон; това, което зарегистрирате, това и предсказвайте.

Щом лявата и дясната поляризация се срещат еднакво често, всичко това силно напомня линейна поляризация. Да се запитаме какво ще стане, ако регистрираме фотона с помощта на броячи, които възприемат само линейно поляризирана светлина. Поляризацията на γ-квантите не се измерва така леко, както поляризацията на светлината; няма такива поляризатори, които да работят добре на такива къси вълни. Но да си представим, с цел да облекчим обсъждането, че все пак такива има. Нека имаме брояч, който възприема само поляризирана по оста x светлина, а от другата страна на позитрония стои някой, който също наблюдава линейно поляризирана светлина, но поляризирана например само по оста y. Какъв е шансът, че вие двамата едновременно ще регистрирате фотони при анихилацията? Необходимо е да се намери амплитудата за това, че $|F>$ пребивава в състояние $|x_1\ y_2>$. С други думи, ние търсим амплитудата

$$<x_1\ y_2\,|\,F>,$$

която, разбира се, е равна просто на разликата

$$<x_1y_2\,|\,R_1R_2>-<x_1y_2\,|\,L_1L_2>. \qquad (16.21)$$

По-нататък, въпреки че на нас ни трябват двучастични амплитуди за двата фотона, с тях тук можем да работим така, както с амплитудите на отделни частици; нали всяка частица действува независимо от другата. Това означава, че амплитудата $<x_1\ y_2|\ |R_1\ R_2>$ просто е равна на произведението на двете независими амплитуди $<x_1\,|\,R_1>$ и $<y_2\,|\,R_2>$. Тези амплитуди (вж. табл. 15.3, стр. 260) са равни на $\frac{1}{\sqrt{2}}$ и $\frac{i}{\sqrt{2}}$, така че

$$<x_1,\ y_2\,|\,R_1\ R_2>=+\frac{i}{\sqrt{2}}.$$

Аналогично

$$<x_1\ y_2\,|\,L_1\ L_2>=-\frac{i}{2}.$$

Изваждайки тези амплитуди, както е според (16.21), получаваме

$$<x_1\ y_2\,|\,F>=+i, \qquad (16.22)$$

Така че, *ако* вие зарегистрирате фотон с вашия поляризиран по оста x детектор, то и вашият приятел с вероятност *единица* също ще забележи фотон със своя поляризиран по оста y детектор[1].

[1] Ние не нормирахме нашите амплитуди и не ги умножавахме на амплитудите за разпад в едно или в друго крайно състояние, но лесно се вижда, че нашият резултат е верен, тъй като, пресмятайки втората от взаимно изключващите се възможности [вж. (16.23)] ние получаваме вероятност нула.

Сега да предположим, че вашият приятел настройва своя брояч на същата x-поляризация като вас. Тогава той за нищо на света няма да зарегистрира фотон едновременно с вас. Пресмятайки всичко както трябва, вие ще намерите, че

$$<x_1\ x_2 \mid F>=0. \qquad (16.23)$$

Естествено, ако вие настроите вашия брояч на y-поляризация, вашият приятел ще получава резултати, съвпадащи с вашите само тогава, когато той сам настрои своя детектор на x-поляризация.

Всичко това създава интересно положение. Представете си, че вие сте взели парче от исландски шпат, което разделя фотоните на снопове, линейно поляризирани по осите x и y, и във всеки сноп сте поставили по един брояч. Да наречем единия от тях x-брояч, а другия y-брояч. Ако вашият приятел, който стои от другата страна, направи същото, вие винаги можете да го предупредите в кой сноп ще премине неговия фотон. Всеки път когато вие и вашият приятел получавате едновременно импулс, вие можете да погледнете в кой от вашите детектори е попаднал фотон, и да му съобщите кой от неговите броячи е зарегистрирал фотон. Нека при някакъв разпад вие виждате, че фотонът е зарегистриран от вашия x-брояч; тогава вие ще му викнете, че неговият y-брояч е зарегистрирал също фотон.

Много хора, изучаващи квантовата механика по обикновен (старомоден) начин, силно се вълнуват от това обстоятелство. На тях им се иска да считат, че когато фотонът се излъчва, той се движи като вълна с определен характер. Те биха искали да мислят, че тъй като „всеки даден фотон“ има някаква „амплидуда“ за това да се окаже линейно поляризиран по x или y, то трябва да има и определен шанс да се зарегистрира или от x-, или от y-брояча и че този шанс не бива да зависи от това, което регистрира другият човек, наблюдаващ съвсем друг фотон. Те доказват, че „ако някой друг прави измервания, той не може да бъде в състояние да изменя вероятността за това, което аз ще зарегистрирам“. Нашата квантова механика учи обаче, че провеждайки измервания над фотон №1, вие сте в състояние да предскажете точно каква ще бъде поляризацията на фотона №2, когато тя бъде измерена. С това съвсем не е могъл да се съгласи Айнщайн. Този парадокс — т. нар. „парадокс на Айнщайн — Подолски — Розен“ — много го безпокоил. Но ако положението на нещата се опише така, както това беше направено тук, въобще няма никакъв парадокс; съвсем естествено се получава изводът, че това, което се измерва на едно място, е корелирано с това, което се измерва някъде на друго място. За да се получи парадоксален резултат, може да се разсъждава примерно така:

1. Ако вие имате брояч, който ви показва какъв е вашият фотон — десен или ляв — вие можете да предскажете точно поляризацията (дясна или лява) на фотона, който ще зарегистрира вашият приятел.

2. Ето защо всеки фотон, който той приема, трябва да бъде или чисто ляв, или чисто десен, при което една част от фотоните ще бъде от единия вид, а останалите — от другия.

3. Безпорно вие не сте в състояние да измените физическата природа на *неговите* фотони, изменяйки характера на тези наблюдения, които вие извършвате върху *вашите* фотони. Каквито и измервания да правите с вашите фотони, неговите фотони както преди трябва да остават или десни, или леви.

4. Да допуснем, че той сменя своя апарат така, че да разцепи своите фотони с помощта на парче исландски шпат на два линейно поляризирани снопа, след което всички негови фотони ще преминават или в поляризирания по оста x сноп, или в поляризирания по оста y сноп. Съгласно квантовата механика няма никакъв начин да се каже в кой от двата снопа ще премине даден десен фотон. Има 50 %-ва вероятност той да премине в x-снопа и 50 %-ва вероятност — в y-снопа. Същото ще става и с един ляв фотон.

5. Тъй като всеки фотон е или ляв, или десен (в съответствие с точките 2 и 3), всеки от тях трябва с 50%-ва вероятност да премине или в x-снопа, или в y-снопа и е невъзможно да се предскаже какъв път той ще избере.

6. А теорията предсказва, че ако *вие* сте видели, че ваш ият фотон е преминал в x-поляризатора, вие *напълно определено* можете да предскажете, че неговият фотон ще премине в неговия y-поляризиран сноп. Това противоречи на точка 5, така че имаме налице един парадокс.

Но природата очевидно не забелязва този „парадокс", защото опитът показва, че предсказанието, направено в точка 6, наистина е вярно. Ние вече обсъждахме разрешаването на този „парадоск" в една от нашите най-първи лекции по квантовомеханично поведение [вж. гл. 37 (том I)]. В приведеното по-горе разсъждение точките 1, 2, 4 и 6 са правилни, а точка 3, както и нейното следствие-точка 5 — са грешни. Те не дават правилно описание на природата. Разсъждението в точка 3 говори, че с помощта на *вашето* измерване (наблюдавайки десен или ляв фотон) вие можете да определите, кое от двете взаимно изключващи се събития ще се случи при него (ще види ли той десен фотон или ляв), и че дори ако вие *не направите* своите измервания, вие все едно можете да кажете, че при него ще се случи или едното събитие, или другото. В това се състои и същността на разказаното в гл. 37 (том I) — да се подчертае веднага от самото начало, че в Природата нещата съвсем не стоят така. Нейният път изисква описания на езика на интерфериращите амплитуди, по една амплитуда за всяко събитие, изключващо другите събития. Измерване, в което действително се реализира една от възможностите, разрушава интерференцията, но ако измерването *не е било* направено, вие нямате право да говорите, че „все едно ще се реализира или едната възможност, или другата".

Ако вие бихте могли да определите за всеки един от вашите фотони, какъв е той — десен или ляв, — и *освен това*, поляризиран ли е той по оста x (всичко за един и същ фотон), то вие не можете да направите това — пред вас е принципът на неопределеността.

Ако вие все още не сте удовлетворени и считате, че това е „парадокс", покажете, че това наистина е парадокс: измислете такъв въображаем опит, за който теорията на квантовата механика с две различни разсъждения да предсказва два несъгласуващи се резултата. В противен случай „парадоксът" е просто конфликт между това, което е всъщност, и вашето усещане за това, каква „би следвало да бъде" реалната природа.

Вие считате, че това не е „парадокс", но че това все пак е много странно? С това всички ние можем да се съгласим. Именно това прави физиката така очарователно интересна.

16-4. Матрици на въртене за произволен спин

Аз се надявам, че сега вече на вас ви е ясно колко важна е представата за момента на количеството на движение за разбиране на атомните процеси. Досега ние разглеждахме само системи със спинове (или „пълни моменти на количеството на движение") 0, 1/2 и 1. Но има, разбира се, атомни системи с по-големи моменти на количеството на движение. При анализа на такива системи са нужни също таблици на амплитудите на въртене, каквито вече бяха приведени в гл. 15, §6. С други думи, нужни са матриците на амплитудите за спин 3/2, 2, 5/2, 3 и т. н. Ние няма да пресмятаме подробно тези таблици, но бихме искали да покажем как това се прави, за да може вие сами да извършвате пресмятания, ако това ви се наложи.

Както видяхме по-рано, всяка система със спин или „пълен момент на количеството на движение" j може да се намира в едно от възможните $2j+1$ на брой състояния, в които z-компонентата на момента на количеството на движение приема едно

от дискретните стойности j, $j-1$, $j-2$, . . . , $-(j-1)$, $-j$ (всички в единици $\hbar$). Ако означим z-компонентата на момента на количеството на движение на произволно избрано състояние с $m\hbar$, можем да определим състоянието на момента на количеството на движение, задавайки числените стойности на двете „квантови числа" на момента на количеството на движение" j и m. Това състояние се бележи с вектора на състоянието $|j, m\rangle$. В случай на частица със спин 1/2 има две състояния $|1/2, 1/2\rangle$ и $|1/2, -1/2\rangle$, а състоянията на система със спин 1 в тези означения могат да се запишат така: $|1, +1\rangle$, $|1, 0\rangle$ и $|1, -1\rangle$. Частица със спин 0, разбира се, може да има само едно състояние: $|0, 0\rangle$.

Сега ние можем да видим какво става, когато проектираме произволно състояние $|j, m\rangle$ в една координатна система със завъртени оси. Преди всичко известно е, че j е число, което характеризира *системата*, затова то не се изменя. При завъртане на осите ние ще получим просто смес от състояния с различни стойности на m при едно и също j. В общия случай възниква амплитуда за това, че системата в завъртяната координатна система се оказва в състояние $|j, m'\rangle$, където m' е новата z-компонента на момента на количеството на движение. Следователно на нас ни трябват матричните елементи $\langle j, m' | R | j, m\rangle$ за всяко въртене. Ние вече знаем какво става, когато системата се завърта около оста z на ъгъл φ. Новото състояние е просто старото, но умножено с $e^{im\varphi}$; то има като преди същата стойност за m. Това може да се запише така

$$R_z(\varphi)\,|j, m\rangle = e^{im\varphi}\,|j, m\rangle \tag{16.24}$$

или, ако искате, още и така

$$\langle j, m' | R_z(\varphi) | j, m\rangle = \delta_{m,m'}\, e^{im\varphi} \tag{16.25}$$

(където $\delta_{mm'}$ е 1, ако $m' = m$ и нула в останалите случаи).

При завъртане около коя да е друга ос възниква смесване на различни m-състояния. Разбира се, бихме могли да се опитаме да пресметнем матричните елементи за произволно въртене, зададено с ъглите на Ойлер α, β и γ. Но ще бъде по-лесно, ако си помним, че всяко въртене може да бъде съставено от три завъртания $R_z(\gamma)$, $R_y(\alpha)$, $R_z(\beta)$; така че, ако ние знаем матричните елементи на въртене около оста y, вече имаме всичко необходимо.

Как да намерим матрицата, съответстваща на завъртане на частица със спин j на ъгъл θ около оста y? Ако се опираме на основните закони (и на онова, което вече имахме), тази задача не може да бъде решена лесно. В случая на спин 1/2 ние постъпихме така: изведохме всичко, което трябва, използувайки доста сложни съображения за симетрия. За спин 1 това беше направено по друг начин: ние разгледахме частен случай, когато системата със спин 1 е получена от две системи със спин 1/2. Ако вие последвате нашия пример и признаете за правилен този факт, че в общия случай крайният резултат зависи само от спина j, а не от това, как са скрепени помежду си различните части на системата със спин j, то ние ще можем да обобщим разсъжденията за спин 1 и за случая на произволен спин. Ние можем например да изградим една изкуствена система със спин 3/2 от три обекта със спин 1/2. Ние можем даже да избегнем всички възможни усложнения, като си представим, че всички те са различни частици — да речем протон, електрон и мюон. Трансформирайки всеки обект със спин 1/2, ние ще видим какво става с цялата система — трябва само да си спомним, че за комбинираното състояние всички амплитуди се умножават. Нека да видим как се работи в този случай.

Да допуснем, че сме разположили и трите обекта със спин 1/2 така, че спиновете им са ориентирани нагоре; да означим това състояние с $|+++\rangle$. Ако наблюдаваме това състояние от една завъртяна около оста z на ъгъл φ координатна система, ще

видим, че всеки плюс си остава плюс, но умножен с $e^{i\varphi/2}$. Ние имаме три такива множителя, така че

$$R_z(\varphi)|+++> = e^{i(3\varphi/2)}|+++>. \qquad (16.26)$$

Ясно е, че $|+++>$ е едно състояние с $m=+3/2$, т. е. $|3/2, +3/2>$.

Ако след това завъртим тази система около оста y, за всеки един от обектите със спин 1/2 ще се появи някаква амплитуда да бъде в състояние $|+>$ или в състояние $|->$, така че цялата система сега ще се превърне в смес от следните осем възможни комбинации: $|+++>$, $|++->$, $|+-+>$, $|-++>$, $|+--->$, $|-+->$, $|--+>$ или $|--->$. Ясно е обаче, че тези състояния могат да бъдат разпределени на четири групи, така че на всяка група да съответствува определена стойност на m. Преди всичко имаме състоянието $|+++>$, за което $m=3/2$. След това има три състояния $|++->$, $|+-+>$ и $|-++>$ — всяко с два плюса и един минус, тъй като всеки от трите обекта има равни шансове да заеме състояние $|->$ след завъртането, то всяко едно от тези състояния трябва да участвува равноправно в сложната система. Затова ще вземем комбинацията

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\{|++->+|+-+>+|-++>\}, \qquad (16.27)$$

в която множителят $1/\sqrt{3}$ нормира така полученото състояние. Ако това състояние завъртим около оста z на ъгъл φ, ще получим множител $e^{i\varphi/2}$ за всеки плюс и $e^{-i\varphi/2}$ за всеки минус. Всяко събираемо в (16.27) ще получи множител $e^{i\varphi/2}$ и този общ множител може да се изнесе пред скобите. Такова състояние съответствува на нашата представа за състояние с $m=+\frac{1}{2}$; ние стигаме до извода, че

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\{|++->+|+-+>+|-++>\}=|\tfrac{3}{2},+\tfrac{1}{2}>. \qquad (16.28)$$

По същия начин можем да напишем

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\{|+-->+|-+->+|--+>\}=|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2}>, \qquad (16.29)$$

което съответствува на състояние с $m=-1/2$.

Обърнете внимание на това, че тук вземаме само *симетрични* състояния; ние нямаме комбинации, в които да влизат събираеми със знак минус. Те биха отговаряли на състояния със същото m, но с друго j. Това е аналогично на случая със спин 1, където $1/\sqrt{2}\{|+->+|-+>\}$ беше състоянието $|1,0>$, а $1/\sqrt{2}\{|+->-|-+>\}$ беше състоянието $|0,0>$. На края ние имаме

$$|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2}>=|--->. \qquad (16.30)$$

Тези четири състояния са обединени в таблицата 16.1.

Таблица 16.1

Състояния със спин 3/2

$\|+++>$	$=\left\|\frac{3}{2},+\frac{3}{2}\right>$
$\frac{1}{\sqrt{3}}\{\|++->+\|+-+>+\|-++>\}$	$=\left\|\frac{3}{2},+\frac{1}{2}\right>$
$\frac{1}{\sqrt{3}}\{\|+-->+\|-+->+\|--+>\}$	$=\left\|\frac{3}{2},-\frac{1}{2}\right>$
$\|--->$	$=\left\|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right>$

Всичко, което ни остава да направим сега, е да вземем всяко състояние, да го завъртим около оста y и да видим колко нови състояния ще възникнат от него, като използуваме известната ни вече матрица на въртене за частици със спин 1/2. Можем да постъпим така, както правихме това в случая със спин 1 [вж. гл. 10, § 6]. (Само че сега алгебрата е по-сложна.) Ние ще следваме строго идеите, изложени в гл. 10, т. III, така че няма да даваме подробни обяснения. В системата S състоянията ще означаваме така

$$\left|\tfrac{3}{2},+\tfrac{3}{2},S\right\rangle = |+++\rangle$$

$$\left|\tfrac{3}{2},+\tfrac{1}{2},S\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\{|++-\rangle + |+-+\rangle + |-++\rangle\}$$

и т. н.; ще считаме че T-системата е завъртяна на ъгъл θ около оста y на системата S. Състоянията в T-системата ще означаваме с $\left|\tfrac{3}{2},+\tfrac{3}{2},T\right\rangle$, $\left|\tfrac{3}{2},+\tfrac{1}{2},T\right\rangle$ и т. н. Ясно е, че $\left|\tfrac{3}{2},+\tfrac{3}{2},T\right\rangle$ е състоянието $|+'+'+'\rangle$ (примовете винаги се отнасят за T-системата). Аналогично $|3/2,+1/2,T\rangle$ ще бъде равно на

$$\frac{1}{\sqrt{3}}\{|+'+'-'\rangle + |+'-'+'\rangle + |-'+'+'\rangle\}$$

и т. н. Всяко $|+'\rangle$-състояние в T-системата се получава както от $|+\rangle$-, така и от $|-\rangle$-състоянията в системата S с помощта на матричните елементи от табл. 10.4 (т. III, стр. 177).

Ако обаче имаме три частици със спин 1/2, тогава (10.47) трябва да се замени с равенството

$$\begin{aligned}|+++\rangle = a^3|+'+'+'\rangle + a^2b\{|+'+'-'\rangle + |+'-'+'\rangle \\ + |-'+'+'\rangle\} + ab^2\{|+'-'-'\rangle + |-'+'-'\rangle + |-'-'+'\rangle\} \\ + b^3|-'-'-'\rangle.\end{aligned} \tag{16.31}$$

Използувайки означенията от табл. 10.4 ще получим вместо (10.48) следното уравнение:

$$\begin{aligned}\left|\tfrac{3}{2},+\tfrac{3}{2},S\right\rangle = a^3\left|\tfrac{3}{2},+\tfrac{3}{2},T\right\rangle + \sqrt{3}\,a^2b\left|\tfrac{3}{2},+\tfrac{1}{2},T\right\rangle \\ + \sqrt{3}\,ab^2\left|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2},T\right\rangle + b^3\left|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2},T\right\rangle.\end{aligned} \tag{16.32}$$

Това вече ни дава някои от матричните елементи $\langle j\,T|\,i\,S\rangle$. За да получим израз за $|3/2,+1/2,S\rangle$, трябва да тръгнем от формулата за трансформиране на състояние с два плюса и един минус. Например

$$\begin{aligned}|++-\rangle = a^2c|+'+'+'\rangle + a^2d|+'+'-'\rangle + abc|+'-'+'\rangle \\ + bac|-'+'+'\rangle + abd|+'-'-'\rangle + bad|-'+'-'\rangle \\ + b^2c|-'-'+'\rangle + b^2d|-'-'-'\rangle.\end{aligned} \tag{16.33}$$

Като прибавим двата подобни израза за $|+-+\rangle$ и $|-++\rangle$ и разделим с $\sqrt{3}$, намираме

$$\begin{aligned}\left|\tfrac{3}{2},+\tfrac{1}{2},S\right\rangle = \sqrt{3}\,a^2c\left|\tfrac{3}{2},+\tfrac{3}{2},T\right\rangle + (a^2d+2abc)\left|\tfrac{3}{2},+\tfrac{1}{2},T\right\rangle \\ + (2bad+b^2c)\left|\tfrac{3}{2},-\tfrac{1}{2},T\right\rangle + \sqrt{3}\,b^2d\left|\tfrac{3}{2},-\tfrac{3}{2},T\right\rangle.\end{aligned} \tag{16.34}$$

Продължавайки този процес, ние ще намерим всички елементи $\langle j\,T|\,iS\rangle$ на трансформационната матрица. Те са приведени в табл. 16.2. Първата колонка се получава от (16.32), а втората — от (16.34). Последните две колонки са пресметнати по същия начин.

Сега да допуснем, че T-системата е била завъртяна относно S системата на ъгъл θ около нейната ос y. Тогава a, b, c и d ще бъдат [вж. (10.54)]: $a=d=\cos\theta/2$, $c=-b=\sin\theta/2$. Като заместим тези величини в табл. 16.2, получаваме формули, подобни на втората половина на табл. 15.2, но този път за система със спин 3/2.

Таблица 16.2

Матрица на въртене за частици със спин $^3/_2$

Коефициентите a, b, c и d са обяснени в табл. 10.4).

$<jT \mid iS>$	$\left\|\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}, S\right>$	$\left\|\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}, S\right>$	$\left\|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, S\right>$	$\left\|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}, S\right>$
$\left\|\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}, T\right>$	a^3	$\sqrt{3}a^2c$	$\sqrt{3}ac^2$	c^3
$\left\|\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}, T\right>$	$\sqrt{3}a^2b$	$a^2d+2abc$	$c^2b+2dac$	$\sqrt{3}c^2d$
$\left\|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, T\right>$	$\sqrt{3}ab^2$	$2bad+b^2c$	$2cdb+d^2a$	$\sqrt{3}cd^2$
$\left\|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}, T\right>$	b^3	$\sqrt{3}b^2d$	$\sqrt{3}bd^2$	d^3

Разсъжденията, които ние току-що проведохме, са били обобщени за система с произволен спин j. Състоянията $\mid j, m>$ могат да бъдат съставени от $2j$ частици всяка със спин $^1/_2$. (От тях $j+m$ ще бъдат в $\mid +>$-състояние, а $j-m$ в $\mid ->$-състояние.) Провежда се сумиране по всички възможни начини, по които те могат да бъдат комбинирани, а след това състоянията се нормират чрез умножаване със съответна константа. Ако вие имате математически способности, можете да докажете, че се получава следният резултат[1]:

$$<j, m' \mid R_y(\theta) \mid j, m> = [(j+m)!\,(j-m)!\,(j+m')!\,(j-m')!]^{1/2} \times \sum_k \frac{(-1)^k (\cos\theta/2)^{2j+m'-m-2k} (\sin\theta/2)^{m-m'+2k}}{(m-m'+k)!\,(j+m'-k)!\,(j-m-k)!\,k!}, \qquad (16.35)$$

където k пробягва всички онези стойности, при които под знака факториал се получава неотрицателно число.

Това е много сложна формула, но с нейна помощ вие можете да проверите табл. 15.2 за $j=1$ (стр. 260) и да съставите ваши собствени таблици за по-големи j. Някои матрични елементи са много важни и са получили особени названия. Например матричните елементи за $m=m'=0$ и цели j са известни под названието полиноми на Лежандър и се означават по следния начин:

$$<j, 0 \mid R_y(\theta) \mid j, 0> = P_j(\cos\theta). \qquad (16.36)$$

Първите четири полинома са

$$P_0(\cos\theta)=1, \qquad (16.37)$$

$$P_1(\cos\theta)=\cos\theta, \qquad (16.38)$$

$$P_2(\cos\theta)=\frac{1}{2}(3\cos^2\theta-1), \qquad (16.39)$$

$$P_3(\cos\theta)=\frac{1}{2}(5\cos^3\theta-3\cos\theta). \qquad (16.40)$$

[1] Подробности ще намерите в приложението на стр. 284.

16-5. Измерване на ядрения спин

Сега ще разгледаме един пример, където се използуват токущо описаните коефициенти. Той е свързан с направените неотдавна интересни опити, които вие сега сте в състояние да разберете. Някои физици решили да узнаят спина на едно от възбудените състояния на ядрото Ne^{20}. За тази цел те са заели да бомбардират въглеродна мишена със сноп ускорени йони на въглерода и създали нужното им възбудено състояние на Ne^{20} (което се означава с Ne^{20*}) в реакцията

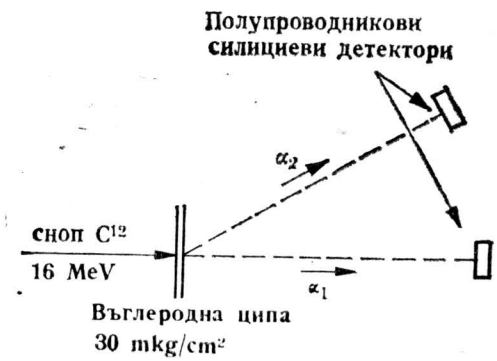
$$C^{12} + C^{12} \rightarrow Ne^{20*} + \alpha_1,$$

където α_1 е α-частица, или He^4. Някои от създадените по този начин състояния на Ne^{20} са неустойчиви и се разпадат по следната схема

$$Ne^{20*} \rightarrow O^{16} + \alpha_2.$$

Следователно в опита се наблюдават възникващите в реакцията две α-частици. Ние сме ги означили с α_1 и α_2. Тъй като те излитат с различни енергии, могат лесно да бъдат различени една от друга. Освен това, избирайки α_1 с нужната енергия, ние можем да подберем всякакви възбудени състояния на Ne^{20}.

Опитът е бил поставен така, както е показано на фиг. 16.9. Сноп въглеродни йони с енергия 16 MeV се насочва към въглеродна фолия. Първата α-частица се регистрира от силициев детектор, настроен за приемане на α-частици с нужната енергия, движещи се напред (спрямо падащия поток йони на C^{12}). Втората α-частица се регистрира от брояча α_2, поставен под ъгъл θ спрямо α_1. Скоростта на отброените сигнали на съвпадения от α_1 и α_2 се измерва като функция на ъгъла θ.



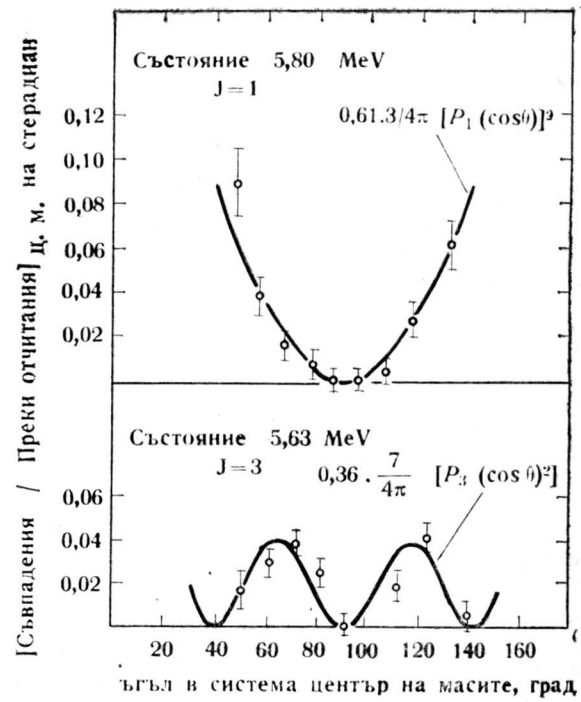
Фиг. 16.9. Разположение на приборите в експеримента за определяне спина на възбудените състояния на Ne^{20}

Идеята на опита е следната: Преди всичко трябва да се знае, че спиновете на C^{12}, O^{16} и α-частици са равни на нула. Нека посоката на движение на началните частици C^{12} съвпада с оста $+z$; тогава е известно, че Ne^{20*} трябва да има нулев момент на количеството на движение относно оста z. Това е така, тъй като всички останали частици нямат спин. Освен това C^{12} долита по оста z и α_1 отлита по оста z, така че те не могат да имат момент относно тази ос. И какъвто и да е спинът j на ядрото Ne^{20*}, ние знаем, че това ядро се намира в състояние $|j, 0>$. Какво ще се случи, когато Ne^{20*} се разпадне на O^{16} и на друга α-частица? Броячът α_2 ще зарегистрира α-частицата, а O^{16} ще полети в обратна посока, поради това че началният импулс се запазва[1]. *Спрямо новата ос* (оста α_2) моментът на количеството на движение също не може да има никаква компонента. А щом крайното състояние има спрямо новата ос нулев момент на количеството на движение, за разпада на Ne^{20*} трябва да има някаква амплитуда за това, че $m' = 0$, където m' е квантовото число на компонентата на момента на количеството на движението спрямо новата ос. Вероятността за наблюдаване на α_2 под ъгъл θ ще бъде всъщност равна на квадрата на амплитудата (или на матричния елемент).

$$<j,\ 0\ [R_y(\theta)]\ j,\ 0>. \qquad (16.41)$$

За да получим спина на интересуващото ни състояние на Ne^{20*}, начертаваме кривата на интензивността на попаденията на втората α-частица в брояча α_2 като функция на ъгъла и я сравняваме с теоретичните криви за различни стойности на j. Както отбелязахме, в края на предния параграф, амплитудата $<j,0[R_y(\theta)]j,0>$ е просто функцията $P_j(\cos\theta)$. Следователно ъгловите разпределения ще се дават от кривите $[P_j(\cos\theta)]^2$. Експерименталните

[1] Импулсът на отскачането, което изпитва Ne^{20*} в първата реакция, може да се пренебрегне. Или още по-добре, — да се пресметне и да се въведе съответна корекция.



Фиг. 16.10. Експериментални резултати от измерването на ъгловото разпределение на α-частиците, излитащи при разпада на две възбудени състояния на Ne^{20}.
Те са получени с помощта на устройството, показано на фиг. 16.9

резултати за две възбудени състояния са показани на фиг. 16.10. Вие виждате, че ъгловото разпределение за състоянието 5,80 MeV много добре съвпада с кривата $[P_1 (\cos \theta)]^2$, т. е. то е състояние със спин 1. От друга страна, данните за състоянието 5,63 MeV изглеждат съвсем иначе; те лягат на кривата $[P_3(\cos\theta)]^2$. Спинът на това състояние е равен на 3.

В този опит ние измерихме момента на количеството на движение на възбудените състояния на Ne^{20*}. Тази информация може да бъде използувана, за да се разбере какво е поведението на протоните и на неутроните в това ядро, а това ще ни даде допълнителни сведения за тайнствените ядрени сили.

16-6. Събиране на моменти на количеството на движение

Когато ние изучавахме свръхтънката структура на водородния атом в гл. 10, на нас ни се наложи да пресмятаме вътрешните състояния на системата, съставена от две частици — електрон и протон — със спинове 1/2. Ние намерихме, че четворката възможни спинови състояния на такава система може да бъде разбита на две: на група от три състояния с една и съща енергия, които във външно поле имат поведение на частица със спин 1 и на останалото състояние, което има поведение на частица със спин 0. С други думи, обединявайки две частици със спин 1/2, ние можем да образуваме система, „пълният спин" на която е равен или на единица, или на нула. В този параграф ние искаме да разгледаме на по-високо ниво спиновите състояния на *система*, съставена от две частици с произволни спинове. Това е друга важна проблема, свързана с момента на количеството на движение на квантовомеханичните системи.

Да напишем най-напред резултатите от гл. 10 за атома на водорода във форма, която ще ни даде възможност да ги разпространим за по-общ случай. Ние започнахме с две частици, които сега ще означим така: частица a (електрон) и частица b (протон). Спинът на частицата a беше равен на j_a (= 1/2), а z—компонентата на момента на количеството на движение m_a може да приема една от няколкото възможни стойности (всъщност две, а именно $m_a = +1/2$ или $m_a = -1/2$). Аналогично спиновото състояние на частицата b се описваше с нейния спин j_b и z-ком-

понентата на момента на количеството на движение m_b. От всичко това беше възможно да се съставят няколко комбинации на спиновите състояния на двете частици. Например от частицата a с $m_a = 1/2$ и от частицата b с $m_b = -1/2$ можеше да бъде образувано състоянието $|a,+1/2;\ b,-1/2\rangle$. Въобще обединените състояния образуваха система, чийто „спин“ или „пълен спин“, или „пълен момент на количеството на движение“ J можеше да бъде равен или на единица, или на нула, а z-компонентата на момента на количеството на движение M можеше да се равнява на $+1,0$ или -1 при $J=1$ или на нула при $J=0$. На този език формулите (10.41) и (10.42) могат да се препишат така, както е показано в табл. 16.3.

Лявата колонка на таблицата описва съставното състояние чрез неговия пълен момент на количеството на движение J и z-компонентата M. Десният стълбец показва как се съставят тези състояния от стойностите на m за двете частици a и b.

Таблица 16.3

Съставяне на момента на количеството на движение за две частици със спин $^1/_2$ ($j_a=^1/_2$, $j_b=^1/_2$)

$\|\ J=1,\ M=+1\rangle = \|\ a,\ +^1/_2;\ b,\ +^1/_2\rangle$
$\|\ J=1,\ M=0\rangle = 1/\sqrt{2}\{\|\ a,\ +^1/_2;\ b,\ -^1/_2\rangle + \|\ a,\ -^1/_2;\ b,\ +^1/_2\rangle\}$
$\|\ J=1,\ M=-1\rangle = \|\ a,\ -^1/_2,\ b;\ -^1/_2\rangle$
$\|\ J=0,\ M=0\rangle = 1/\sqrt{2}\{\|\ a,\ +^1/_2;\ b,\ -^1/_2\rangle - \|\ a,\ -^1/_2;\ b,\ +^1/_2\rangle\}$

Ние искаме да обобщим този резултат за състояния, съставени от два обекта a и b с произволни спинове j_a и j_b. Ще започнем с разбор на примера, когато $j_a=^1/_2$ и $j_b=1$, а именно с атома на деутерия, в който частицата a е електронът e, а частицата b — ядрото, т. е. деутронът d. Тогава $j_a=j_e=^1/_2$. Деутронът е образуван от един протон и един неутрон в състояние с пълен спин 1, така че $j_b=j_d=1$. Ние искаме да разгледаме свръхфините състояния на деутерия, както направихме това за водорода. Тъй като деутронът може да има три състояния, $m_b=m_d=+1,\ 0,\ -1$, а електронът — две, $m_a=m_e=+\frac{1}{2},-\frac{1}{2}$, имаме всичко шест възможни състояния, а именно (използуваме означението $|\ e,\ m_e;\ d,\ m_d\rangle$):

$$
\begin{aligned}
&|\ e,\ +\tfrac{1}{2};\ d,\ +1\ \rangle,\\
&|\ e,\ +\tfrac{1}{2};\ d,\ 0\rangle; \qquad |\ e,\ -\tfrac{1}{2};\ d,\ +1\ \rangle,\\
&|\ e,\ +\tfrac{1}{2};\ d,\ -1\rangle; \qquad |\ e,\ -\tfrac{1}{2};\ d,\ 0\rangle,\\
&|\ e,\ -\tfrac{1}{2};\ d,\ -1\ \rangle.
\end{aligned}
\tag{16.42}
$$

Обърнете внимание, че ние сме групирали състоянията в зависимост от стойностите на сумата m_e+m_d по реда на нейното намаляване.

Да запитаме сега какво ще се случи с тези състояния, ако ги проектираме в друга координатна система? Ако тази нова система е просто завъртяна на ъгъл φ около оста z, състоянието $|e,\ m_e;\ d,\ m_d\rangle$ се умножава с

$$
e^{im_e\varphi}\,e^{im_d\varphi} = e^{i\,(m_e+m_d)\varphi}\,. \tag{16.43}
$$

(Състоянието може да се разглежда като следното произведение: $|\ e,\ m_e\rangle\,|\ d,\ m_d\rangle$ и всеки вектор на състоянието независимо дава свой собствен експоненциален множител.) Множителят

(16.43) има форма $e^{iM\varphi}$, затова z-компонентата на момента на количеството на движението за състоянието $|\, e,\ m_e;\ d,\ m_d\rangle$ се оказва равна на

$$M = m_e + m_d. \tag{16.44}$$

С други думи, *z-компонентата на пълния момент на количеството на движение е сума от z-компонентите на моментите на количеството на движение на отделните части.*

Следователно в списъка на състоянията (16.42) горното състояние има $M = +{}^3/_2$, двете следващи имат $M = +{}^1/_2$, за следващите две $M = -{}^1/_2$ и последното състояние има $M = -{}^3/_2$. Ние веднага виждаме, че една от възможностите за спина J на обединеното състояние (за пълния момент на количеството на движение) трябва да бъде ${}^3/_2$: това изисква четири състояния с $M = +{}^3/_2,\ +{}^1/_2,\ -{}^1/_2$ и $-{}^3/_2$.

За $M = +{}^3/_2$ има само един кандидат и ние веднага можем да напишем

$$|\, J = {}^3/_2,\ M = +{}^3/_2\rangle = |\, e,\ +{}^1/_2;\ d,\ +1\,\rangle. \tag{16.45}$$

Но кое е състоянието $|\, J = {}^3/_2,\ M = +{}^1/_2\,\rangle$? Кандидати за това състояние са $|\, e,\ +{}^1/_2;\ d,\ 0\rangle$ и $|\, e,\ -{}^1/_2;\ d,\ 1\,\rangle$, които стоят във втория ред на (16.42). Всяка тяхна линейна комбинация също дава $M = +{}^1/_2$. Значи в общия случай може да се очаква, че

$$|\, J = {}^3/_2,\ M = +{}^1/_2\rangle = \alpha\,|\, e,\ +{}^1/_2,\ d = 0\,\rangle + \beta\,|\, e,\ -{}^1/_2;\ d,\ 1\,\rangle, \tag{16.46}$$

където α и β са две числа. Те се наричат *коефициенти на Клебш-Гордан*. Нашата следваща задача е да намерим тези коефициенти.

И ние лесно ще ги намерим, ако просто си спомним, че деутронът се състои от неутрон и протон, и напишем в явен вид състоянията на деутрона, използувайки правилата от табл. 16.3. Ако това се направи, изброените в (16.42) състояния ще изглеждат така, както е показано в табл. 16.4.

Ние искаме да образуваме четворка състояния с $J = {}^3/_2$, като използуваме състоянията от тази таблица. Но отговорът на този въпрос вече ни е известен, тъй като в табл. 16.1 вече са дадени състоянията със спин ${}^3/_2$, образувани от три частици със спин ${}^1/_2$. Първото състояние в табл. 16.1 има $J = {}^3/_2$, $M = +{}^3/_2$ или $|\, +++\,\rangle$, а в нашите сегашни означения $|\, e,\ +\frac{1}{2};\ n,\ +\frac{1}{2};\ p,\ +\frac{1}{2}\,\rangle$; това е първото състояние в табл. 16.4. Но това състояние е първото в списъка (16.42), така че нашата формула (16.45) се потвърждава. Вторият ред в таблица 16.1, показва, ако използуваме нашите сегашни означения, че

$$|\, J = {}^3/_2,\ M = +{}^1/_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\Big\{ |\, e,\ +\tfrac{1}{2};\ n,\ +\tfrac{1}{2};\ p,\ -\tfrac{1}{2}\rangle + |\, e,\ +\tfrac{1}{2};\ n,\ -\tfrac{1}{2};\ p,\ +\tfrac{1}{2}\rangle + |\, e,\ -\tfrac{1}{2};\ n,\ +\tfrac{1}{2};\ p,\ +\tfrac{1}{2}\rangle\Big\}. \tag{16.47}$$

Изразът, който стои отдясно, може очевидно да се състави от двата члена във втория ред на табл. 16.4, като се вземе $\sqrt{{}^2/_3}$ от първия член и $\sqrt{{}^1/_3}$ от втория. С други думи, изразът (16.47) е еквивалентен на

$$|\, J = {}^3/_2,\ M = +{}^1/_2\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|\, e,\ +{}^1/_2;\ d,\ 0\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|\, e,\ -{}^1/_2;\ d,\ 1\rangle. \tag{16.48}$$

Таблица 16.4

Състояния на момента на количеството на движение за атома на деутерия

$$m=\frac{3}{2}$$

$$|e,+\tfrac{1}{2};\ d,+1\rangle=|e,+\tfrac{1}{2};\ n,+\tfrac{1}{2};\ p,+\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|e,+\tfrac{1}{2};\ d,0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|e,+\tfrac{1}{2};\ n,+\tfrac{1}{2};\ p,-\tfrac{1}{2}\rangle+|e,+\tfrac{1}{2};\ n,-\tfrac{1}{2};\ p,+\tfrac{1}{2}\rangle\right\}$$

$$|e,-\tfrac{1}{2};\ d,+1\rangle=|e,-\tfrac{1}{2};\ n,+\tfrac{1}{2};\ p,+\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$m=-\frac{1}{2}$$

$$|e,+\tfrac{1}{2};\ d,-1\rangle=|e,+\tfrac{1}{2};\ n,-\tfrac{1}{2};\ p,-\tfrac{1}{2}\rangle$$

$$|e,-\tfrac{1}{2};\ d,0\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|e,-\tfrac{1}{2};\ n,+\tfrac{1}{2};\ p,-\tfrac{1}{2}\rangle+|e,-\tfrac{1}{2};\ n,-\tfrac{1}{2};\ p,+\tfrac{1}{2}\rangle\right\}$$

$$m=-\frac{3}{2}$$

$$|e,-\tfrac{1}{2};\ d,-1\rangle=|e,-\tfrac{1}{2};\ n,-\tfrac{1}{2};\ p,-\tfrac{1}{2}\rangle$$

Ние определихме двата първи наши коефициента на Клебш — Гордан α и β [вж. (16.46)]:

$$\alpha=\sqrt{\frac{2}{3}},\qquad \beta=\sqrt{\frac{1}{3}}. \tag{16.49}$$

Повтаряйки същата процедура, намираме

$$|J=\tfrac{3}{2},\ M=-\tfrac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{1}{3}}\,|e,+\tfrac{1}{2};\ d,-1\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}\,|e,-\tfrac{1}{2};\ d,0\rangle, \tag{16.50}$$

а, разбира се, също тъй

$$|J=\tfrac{3}{2};\ M=-\tfrac{3}{2}\rangle=|e,-\tfrac{1}{2};\ d,-1\rangle. \tag{16.51}$$

Това са и правилата за съставяне на пълен спин $^3/_2$ от спин 1 и спин $^1/_2$. Ние сме обединили (16.45) и (16.50) в табл. 16.5.

Но ние засега имаме само четири състояния, а системата, която разглеждаме, има шест.

От двете състояния във втория ред на (16.42) при формирането на $|J=^3/_2,\ M=+^1/_2\rangle$ ние съставихме само една линейна комбинация. Има и друга линейна комбинация, ортогонална на използуваната. За нея също $M=+^1/_2$ и тя има вид

$$\sqrt{\frac{1}{3}}\,|e,+\tfrac{1}{2};\ d,0\rangle-\sqrt{\frac{2}{3}}\,|e,-\tfrac{1}{2};\ d,+1\rangle. \tag{16.52}$$

Таблица 16.5

Състояния с $J=3/2$ за атома на деутерия

$$|J=\frac{3}{2},\ M=+\frac{3}{2}\rangle=|e,+\frac{1}{2};\ d,+1\rangle$$

$$|J=\frac{3}{2},\ M=+\frac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{2}{3}}\,|e,+\frac{1}{2};\ d,0\rangle+\sqrt{\frac{1}{3}}\,|e,-\frac{1}{2};\ d,1\rangle$$

$$|J=\frac{3}{2},\ M=-\frac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{1}{3}}\,|e,+\frac{1}{2};\ d,-1\rangle+\sqrt{\frac{2}{3}}\,|e,-\frac{1}{2},\ d,0\rangle$$

$$|J=\frac{3}{2},\ M=-\frac{3}{2}\rangle=|e,-\frac{1}{2};\ d,-1\rangle$$

По същия начин от двете състояния в третия ред на (16.42) могат да се съставят две взаимноортогонални състояния, всяко едно с $M=-1/2$. Ортогоналното на (16.50) състояние има вид

$$\sqrt{\frac{2}{3}}\,|e,+\frac{1}{2};\ d,-1\rangle-\sqrt{\frac{1}{3}}\,|e,-\frac{1}{2};\ d,0\rangle. \quad (16.53)$$

Точно това са двете останали състояния. За тях $M=m_e+m_d=\pm\frac{1}{2}$; те трябва да съответствуват на $J=1/2$. И тъй ние имаме

$$|J=\frac{1}{2},\ M=+\frac{1}{2}\rangle=\sqrt{\frac{1}{3}}\,|e,+\frac{1}{2};\ d,0\rangle-\sqrt{\frac{2}{3}}\,|e,-\frac{1}{2};\ d,+1\rangle,\quad |J=\frac{1}{2},\ M=-\frac{1}{2}\rangle$$
$$=\sqrt{\frac{2}{3}}\,|e,+\frac{1}{2};\ d,-1\rangle-\sqrt{\frac{1}{3}}\,|e,-\frac{1}{2};\ d,0\rangle. \quad (16.54)$$

Можем да се убедим, че тези две състояния наистина имат поведение на състояния на обект със спин $1/2$. За тази цел дейтронната част трябва да се изрази чрез неутронните и протонните състояния (с помощта на табл. 16.3). Първото състояние в (16.53) ще се превърне в

$$\sqrt{\frac{1}{6}}\left\{|e,+\frac{1}{2};\ n,+\frac{1}{2};\ p,-\frac{1}{2}\rangle+|e,+\frac{1}{2};\ n,-\frac{1}{2};\ p,+\frac{1}{2}\rangle\right\}-\sqrt{\frac{2}{3}}\,|e,-\frac{1}{2};\ n,+\frac{1}{2};\ p,+\frac{1}{2}\rangle, \quad (16.55)$$

а това може да се препише така:

$$\sqrt{\frac{1}{3}}\left[\sqrt{\frac{1}{2}}\left\{|e,+\frac{1}{2};\ n,+\frac{1}{2};\ p,-\frac{1}{2}\rangle-|e,-\frac{1}{2};\ n,+\frac{1}{2};\ p,+\frac{1}{2}\rangle\right\}+\sqrt{\frac{1}{2}}\left\{|e,+\frac{1}{2};\ n,-\frac{1}{2};\ p,+\frac{1}{2}\rangle-|e,-\frac{1}{2};\ n,+\frac{1}{2};\ p,+\frac{1}{2}\rangle\right\}\right]. \quad (16.56)$$

Погледнете сега израза в първите фигурни скобки и помислете какво се получава при обединяване на e и p. Заедно те образуват състояние с нулев спин (вж. долния ред на табл. 16.3) и не дават принос към момента на количеството на движение. Остава само неутронът. Следователно цялата *първа* фигурна скобка (16.56) при въртене ще има поведение на неутрон, а именно на състояние с $J=1/2$, $M=+1/2$.

Повтаряйки същите разсъждения, ще се убедим, че във *вторите* фигурни скобки (16.56) електронът и неутронът се обединяват така, че образуват нулев момент на количеството на движение и остава само приносът на протона с $m_p=+1/2$. Скобката отново има поведението на обект с $J=1/2$, $M=+1/2$. Значи и целият израз (16.56) се трансформира като $|J=\frac{1}{2},\ M=+\frac{1}{2}\rangle$, което ние искахме да докажем. Състоянието $M=-\frac{1}{2}$, съответстващо на формула (16.56), може да се запише така (навсякъде, където трябва заменяне $1/2$ с $-1/2$):

$$\sqrt{\frac{1}{3}}\left[\sqrt{\frac{1}{2}}\left\{|e,\ +\frac{1}{2};\ n,\ -\frac{1}{2};\ p,\ -\frac{1}{2}\right\rangle - |e,\ -\frac{1}{2};\ n,\ -\frac{1}{2};\ p,\ +\frac{1}{2}\rangle\right\}\right. \tag{16.57}$$
$$\left.+\sqrt{\frac{1}{2}}\left\{|e,\ +\frac{1}{2};\ n,\ -\frac{1}{2};\ p,\ -\frac{1}{2}\right\rangle - |e,\ -\frac{1}{2};\ n,\ +\frac{1}{2};\ p,\ -\frac{1}{2}\rangle\right\}\right].$$

Вие лесно можете да проверите, че това съвпада с втория ред на (16.54), както следва да бъде, ако всяка скобка представлява едно от двете състояния на система със спин 1/2. Следователно нашите резултати се потвърдиха. Деутронът и електронът могат да съществуват в шест спинови състояния, четири от които имат поведение на състоянията на обект със спин 3/2 (табл. 16.5), а две — на обект със спин 1/2 (16.54).

Ние получихме резултатите в табл. 16.5 и уравнението (16.54), като използувахме това обстоятелство, че деутронът е съставен от неутрон и протон. Валидността на уравненията обаче не зависи от това. За *всеки* обект със спин 1, който се обединява с обект със спин 1/2, законите за обединяването (и коефициентите) са едни и същи. Съвкупността от уравнения в табл. (16.5) означава, че ако координатната система се завърта например около оста y, така че състоянията на частицата със спин 1/2 и на частицата със спин 1 се изменят съгласно табл. 16.1 и 16.2, то линейните комбинации отдясно на знака за равенство ще се изменят така, както това е свойствено на обект със спин 3/2. При същото завъртане състоянията (16.54) ще се изменят като състояния на обект със спин $1/2$. Резултатите зависят сама от свойствата на относителното въртене (т. е. от спиновите състояния) на двете изходни частици, но съвсем не от произхода на техните моменти на количеството на движението. Ние се възползувахме от този произход само при извода на формулите, избирайки частния случай, в който една от съставните части сама е съставена от две частици със спин 1/2 в симетрично състояние. Всички наши резултати са приведени в табл. 16.6, като индексите e и d са заменени с a и b, за да се подчертае тяхната общност.

Да си поставим сега общата задача за намиране на състоянията, които могат да се образуват, като се обединят два обекта с произволни спинове. Да речем единият има спин j_a (така че неговата z-компонента m_a може да приема $2j_a+1$ стойности от $-j_a$ до $+j_a$), а другият — спин j_b (с z-компонентата m_b, приемаща стойности от $-j_b$ до $+j_b$).

Таблица 16.6

Обединяване на частица със спин $^1/_2$ ($j_a=^1/_2$) с частица със спин 1 ($j_b=1$)

$$|J=\tfrac{3}{2},\ M=\tfrac{3}{2}\rangle = |a,\ +\tfrac{1}{2};\ b+1\rangle$$

$$|J=\tfrac{3}{2},\ M=\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|a,\ +\tfrac{1}{2};\ b,\ 0\rangle + \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|a,\ -\tfrac{1}{2};\ b,\ +1\rangle$$

$$|J=\tfrac{3}{2},\ M=-\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|a,+\tfrac{1}{2};\ b,\ -1\rangle + \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|a,-\tfrac{1}{2};\ b,\ 0\rangle$$

$$|J=\tfrac{3}{2},\ M=-\tfrac{3}{2}\rangle = |a,-\tfrac{1}{2};\ b,\ -1\rangle$$

$$|J=\tfrac{1}{2},\ M=+\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|a,+\tfrac{1}{2};\ b,\ 0\rangle - \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|a,-\tfrac{1}{2};\ b,\ +1\rangle$$

$$|J=\tfrac{1}{2},\ M=-\tfrac{1}{2}\rangle = \sqrt{\tfrac{2}{3}}\,|a,+\tfrac{1}{2};\ b,\ -1\rangle - \sqrt{\tfrac{1}{3}}\,|a,-\tfrac{1}{2};\ b,\ 0\rangle$$

Обединените състояния са $|a, m_a; b, m_b\rangle$ и техният брой е $(2j_a+1)(2j_b+1)$. Какви състояния с пълен спин J ще получим?

Пълната z-компонента M на момента на количеството на движение е равна на m_a+m_b и всички състояния могат да се изброят, като се използува величината M [както в (16.42)]. Най-голямото M е единствено; то отговаря на стойностите $m_a=j_a$ и $m_b=j_b$ и просто е равно на j_a+j_b. Това означава, че най-големият пълен спин J е също равен на сумата j_a+j_b:

$$J=M_{\text{макс}}=j_a+j_b.$$

На следващата стойност на M, по-малка с единица от $M_{\text{макс}}$, ще съответствуват две състояния (или m_a, или m_b е по-малко с единица от своята максимална стойност). От тях трябва да бъде образувано едно състояние, принадлежащо на съвкупността с $J=j_a+j_b$, и ще остане още едно, което ще принадлежи на новата съвкупност с $J=j_a+j_b-1$. Следващата стойност на M (третата от горе на долу) може да бъде съставена по *три* начина (от $m_a=j_a-2$, $m_b=j_b$, от $m_a=j_a-1$, $m_b=j_b-1$ и от $m_a=j_a$, $m_b=j_b-2$). Двете от тях принадлежат на вече започнатите групи, а третото ни говори за това, че в разглеждането трябва да се включат и състояния с $J=j_a+j_b-2$. Тези разсъждения ще продължават дотогава, докато стане невъзможно, изменяйки ту едното, ту другото m, получаването на нови състояния.

Нека j_b е по-малко от двете числа j_a и j_b (а ако те са равни, вземете кое да е от тях); тогава ще са необходими само $2j_b$ стойности на пълния спин J, изменящи се със стъпка 1 от j_a+j_b надолу до j_a-j_b. С други думи, когато се обединяват два обекта със спинове j_a и j_b, пълният момент на количеството на движение J на тяхната система може да е равен на едно от следните числа:

$$J=\begin{cases} j_a+j_b \\ j_a+j_b-1 \\ j_a+j_b-2 \\ \cdots\cdots \\ \cdots\cdots \\ \cdots\cdots \\ |j_a-j_b|\,. \end{cases} \qquad (16.58)$$

(Като пишем $|j_a-j_b|$ вместо j_a-j_b, ние можем да избегнем напомнянето за това, че $j_a \geqslant j_b$.)

За *всяка* от тези стойности на J има $2J+1$ състояния с различни стойности на M; M се изменя от $+J$ до $-J$. Всяко от тях е образувано от линейните комбинации на изходните състояния $|a, m_a; b, m_b\rangle$ със съответни коефициенти-коефициентите на Клеб ш-Гордан за всеки отделен член. Може да се счита, че тези коефициенти дават „количеството" състояние $|j_a, m_a; j_b, m_b\rangle$, проявяващо се в състоянието $|J, M\rangle$. Така че всеки коефициент на Клебш-Гордан има, ако желаете, *шест* индекса, показващи неговото положение във формули от типа на приведената в табл. 16.3 и 16.6. Иначе казано, означавайки тези коефициенти с $C(J,M; j_a, m_a; j_b, m_b)$, ние можем да изразим равенството във втория ред на табл. 16.6, така

$$C\left(\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, +\frac{1}{2}; 1, 0\right)=\sqrt{\frac{2}{3}},$$

$$C\left(\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1, +1\right)=\sqrt{\frac{1}{3}}.$$

Таблица 16.7

Обединяване на две частици със спин 1 ($j_a=1$, $j_b=1$)

$$|J=2,\ M=+2\rangle = |a, +1; b, +1\rangle$$

$$|J=2,\ M=+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|a, +1; b, 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|a, 0; b, 1\rangle$$

$$|J=2,\ M=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|a, +1; b, -1\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|a, -1; b, +1\rangle + \frac{2}{\sqrt{6}}|a, 0; b, 0\rangle$$

$$|J=2,\ M=-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|a, 0; b, -1\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|a, -1; b, 0\rangle$$

$$|J=2,\ M=-2\rangle = |a, -1; b, -1\rangle$$

$$|J=1,\ M=+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|a, +1; b, 0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|a, 0; b, +1\rangle$$

$$|J=1,\ M=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|a, +1; b, -1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|a, -1; b, +1\rangle$$

$$|J=1,\ M=-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|a, 0; b, -1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|a, -1; b, 0\rangle$$

$$|J=0,\ M=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\{|a, +1; b, -1\rangle + |a, -1; b, +1\rangle - |a, 0; b, 0\rangle\}$$

Ние няма да пресмятаме тук коефициентите за други частни случаи[1]. Но вие можете да срещнете такива таблици в много книги. Опитайте сами да пресметнете друг случай, например обединяването на два обекта със спин 1. Ние просто даваме окончателния резултат за този случай в табл. 16.7.

Тези закони за обединяване на моментите на количеството на движение са много важни за физиката на елементарните частици, където те имат безброй приложения. За съжаление ние нямаме време да разгледаме повече примери тук.

Приложение 1. Извод на матрицата на въртене[2]

За тези, които биха искали да разберат по-подробно въпроса, ние ще пресметнем сега общата матрица на въртене за система със спин (пълен момент на количеството на движение) j. Пресмятанията за общия случай всъщност не са много необходими; важното е да разберете идеята, а всички резултати вие можете, да намерите в таблиците, които се привеждат в много книги. От друга страна, след като изминахте такъв дълъг път, у вас естествено може да възникне желание да се убедите, че вие наистина сте в състояние да разберете даже такива сложни формули на квантовата механика, каквато е (16.35).

Ще разширим разсъжденията на § 4 за система със спин j, за която ще считаме, че е съставена от $2j$ обекта, всеки със спин $^1/_2$. Състоянието с $m=j$ би имало вид $|+++\ldots+>$ (с $2j$ плюса). За $m=j-1$ ще имаме $2j$ члена от вида $|++\ldots++-+>$, $|++\ldots+-+>$ и т. н. Да разгледаме общия случай, когато имаме r плюса и s минуса, като $r+s=2j$. При завъртане около оста z всеки един от r-те плюса ще даде множител $e^{+i\varphi/2}$ и всеки един от s-те минуса ще даде множител $e^{-i\varphi/2}$. Вследствие на това фазата ще се измени с $i(r/2-s/2)\varphi$. Ние виждаме, че

$$m=\frac{r+s}{2}. \tag{16.59}$$

Както и в случая за $J=^3/_2$, всяко състояние с определено m трябва да бъде сума на всички състояния с едни и същи r и s, взети със знак плюс, т. е. на състоянията, отговарящи на всевъзможните пермутации с r плюса и s минуса. Ние считаме, че ви е известно, че броят на тези пермутации е $(r+s)!/r!\,s!$. За да се нормира всяко състояние, сумата трябва да се раздели на корен квадратен от това число. Можем да пишем

$$\left[\frac{(r+s)!}{r!\,s!}\right]^{-1/2}\Big\{|\underbrace{+++\ldots+}_{r}\underbrace{---\ldots-}_{s}> + \left(\begin{array}{c}\text{Всички пермутации на плюсовете}\\ \text{и минусите}\end{array}\right)\Big\}=|\,j,\,m>, \tag{16.60}$$

където

$$j=\frac{r+s}{2},\qquad m=\frac{r-s}{2}. \tag{16.61}$$

Да въведем нови означения; те ще опростят пресмятанията. Тъй като ние определихме вече състоянията с помощта на (16.60), двете числа r и s определят състоянието не по-лошо от j и m. Ние по-лесно ще проследим пресмятанията, ако означим

$$|\,j,\,m>=\left|\begin{matrix}r\\ s\end{matrix}\right>, \tag{16.62}$$

[1] Още повече, че по-голямата част от работата вече е извършена, щом имаме общата матрица на въртене (16.35).

[2] Първоначално материалът на това приложение влизаше в текста на лекцията, но ние после разбрахме, че не е необходимо в нея да се включва такова подробно изложение.

където [вж. (16.61)]

$$r=j+m, \quad s=j-m.$$

По-нататък ще запишем формулата (16.60), като използуваме *специалното означение*

$$|\, j,\, m\!>=\left|\begin{matrix} r \\ s \end{matrix}\right\rangle=\left[\frac{(r+s)!}{r!\,s!}\right]^{+1/2}\{|+\!>^{r}|-\!>^{s}\}_{\text{пермут}}. \qquad (16.63)$$

Обърнете внимание, че ние сме заменили показателя на степента в общия множител с *плюс* $^1/_2$. Това е направено, защото във фигурните скоби на формула (16.60) има точно $N=(r+s)!/r!\,s!$ събираеми. Ако сравним (16.63) с (16.60), ясно е, че

$$\{\,|+\!>^{r}|-\!>^{s}\}_{\text{пермут}}$$

е по-кратко означение на израза

$$\frac{\{\,|++\ldots--\!>+\text{Всички пермутации}\}}{N},$$

където N е броят на различните събираеми в скобите. Тези означения са удобни с това, че всеки път при завъртане всички знаци плюс внасят един и същ множител, така че общо той се получава в r-та степен. По същия начин всички знаци минус дават някакъв множител в s-та степен независимо от реда, в който стоят.

Сега да предположим, че сме завъртели нашата система около оста y на ъгъл θ. Интересуваме се от $R_y(\theta)\left|\begin{matrix} r \\ s \end{matrix}\right\rangle$. Операторът $R_y(\theta)$, действувайки на всеки $|+\!>$, дава

$$R_y(\theta)\,|+\!>=\,|+\!>C+|-\!>S, \qquad (16.64)$$

където $C=\cos\theta/2$ и $S=\sin\theta/2$. Когато $R_y(\theta)$ действува на $-\!>$, това води до

$$R_y(\theta)\,|-\!>=\,|-\!->C-|+\!>S.$$

Тогава търсеният израз е равен на

$$R(\theta)\left|\begin{matrix} r \\ s \end{matrix}\right\rangle=\left[\frac{(r+s)!}{r!\,s!}\right]^{1/2}R_y(\theta)\,\{\,|+\!>^{r}\,|-\!>^{s}\}_{\text{пермут}}$$

$$=\left[\frac{(r+s)!}{r!\,s!}\right]^{1/2}\{R_y(\theta)\,|+\!>)^{r}\,(R_y(\theta)\,|-\!>)^{s}\}_{\text{пермут}}$$

$$=\left[\frac{(r+s)!}{r!\,s!}\right]^{1/2}\{(\,|+\!>C+|-\!>S)^{r}\,(\,|-\!>C$$

$$-\,|+\!>S)^{s}\}_{\text{пермут}}. \qquad (16.65)$$

Сега биномите трябва да се повдигнат на съответните степени и да се умножат. Ще се появят членове с всички степени на $|+\!>$ от нула до $r+s$. Да видим кои членове ще дадат $|+\!>$ на r'-та степен. Те винаги са придружени от множители от типа $|-\!>^{s'}$, където $s'=2j-r'$. Да ги съберем заедно. Ще получим сума от членове от типа $|+\!>^{r'}|-\!>^{s'}$ с числени коефициенти $A_{r'}$, в които влизат коефициентите на биномиалното развитие заедно с множителите C и S. Уравнението (16.65) още изглежда така

$$R_y(\theta)\left|\begin{matrix} r \\ s \end{matrix}\right\rangle=\sum_{r'=0}^{r+s}\{A_{r'}\,|+\!>^{r'}\,|-\!>^{s'}{}_{\text{пермут}}. \qquad (16.66)$$

Сега да разделим всяко $A_{r'}$ с множителя $[(r'+s')!/r'!\,s'!]^{1/2}$ и да означим частното с $B_{r'}$. Тогава (16.66) приема вида

$$R_y(\theta)\left|\begin{matrix} r \\ s \end{matrix}\right\rangle = \sum_{r'=0}^{r+} B_{r'} \left[\frac{(r'+s')!}{r'!\,s'!}\right]^{1/2} \{\,|\,+\,\rangle^{r'}\,|\,-\rangle^{s'}\}_{\text{пермут}}. \quad (16.67)$$

[Може просто да се каже, че изискването (16.67) да съвпада с (16.65) определя коефициентите $B_{r'}$.]

Ако така определим B_r, останалите множители в дясната част на (16.67) ще бъдат точно състоянията $\left|\begin{matrix} r' \\ s' \end{matrix}\right\rangle$. И тъй ние имаме

$$R_y(\theta)\left|\begin{matrix} r \\ s \end{matrix}\right\rangle = \sum_{r'=0}^{r+s} B_{r'} \left|\begin{matrix} r' \\ s' \end{matrix}\right\rangle, \quad (16.68)$$

където s' винаги е равно на $r+s-r'$. А това, разбира се, означава, че коефициентите $B_{r'}$ са търсените матрични елементи

$$\left\langle\begin{matrix} r' \\ s' \end{matrix}\right| R_y(\theta) \left|\begin{matrix} r \\ s \end{matrix}\right\rangle = B_{r'}. \quad (16.69)$$

За да се намери $B_{r'}$, остава малко: само да се преодолее алгебрата.

Сравнявайки (16.67) с (16.65) и спомняйки си, че $r'+s'=r+s$, ние виждаме, че $B_{r'}$ е просто коефициентът $a^{r'}b^{s'}$ в израза

$$\left(\frac{r'!\,s'!}{r!\,s!}\right)^{1/2}(aC+bS)^r\,(bC-aS)^s. \quad (16.70)$$

Остава само скучната работа да се разложат скобките по формулата за бинома на Нютон и да се съберат всички членове с дадени степени на a и b. Ако вие направите всичко това, ще видите, че коефициентът при $a^{r'}\,b^{s'}$ в (16.70) ими вид

$$\left[\frac{r'!\,s'!}{r!\,s!}\right]^{1/2}\sum_k (-1)^k\,S^{r-r'+2k}\,C^{s+r'-2k}\,\frac{r!}{(r-r'+k)!\,(r'-k)!}\,\frac{s}{(s-k)!\,k!}. \quad (16.71)$$

Сумира се по всички цели k, при които аргументите на факториалите са по-големи или в краен случай равни на нула. Този израз е търсеният матричен елемент.

На края трябва да се върнем към нашите първоначални означения j, m и m', като използуваме формулите

$$r=j+m,\quad r'=j+m',\ s=j-m,\quad s'=j-m'.$$

Извършвайки тези заместявания, получаваме формулата (16.35 от § 4.

Приложение 2. Запазване на четността при излъчване на фотон

В § 1 ние разгледахме излъчването на светлина от атом, който преминава от възбудено състояние със спин 1 в основно състояние със спин 0. Ако спинът на възбуденото състояние е насочен нагоре ($m=+1$), атомът може да излъчи нагоре по оста $+z$ десен фотон или по оста $(-z)$ — ляв фотон. Да означим тези две състояния на фотона с $(R_{НГ}\rangle$ и $|\,L_{НД}\rangle$. Никое от тях няма определена четност. Ако операторът на четността означим с $\hat{P}$, $\hat{P}\,|\,R_{НГ}\rangle = |\,L_{НД}\rangle$ и $\hat{P}\,|\,L_{НД}\rangle = |\,R_{НГ}\rangle$.

Но тогава какво ще стане с нашите предишни доказателства, че един атом в състояние с определена енергия трябва да има определена четност, и с нашето твърдение, че четността се запазва в атомните процеси. Нима в тази задача крайното състояние (състоянието след излъчване на фотона) не трябва да има определена четност? Да, *трябва*, при условие че ние разгледаме *пълното* крайно състояние, в което влизат амплитудите за излъчване на фотони под всевъзможни ъгли. А в § 1 ние разгледахме само част от пълното крайно състояние.

Ако искаме, ние можем да разглеждаме само крайните състояния, които наистина имат определена четност. Да разгледаме например крайното състояние $|\psi_k>$, за което има някаква амплитуда α да се окаже десен фотон, движещ се по оста $+z$, и някаква амплитуда β да се окаже ляв фотон, движещ се по оста $-z$. Можем да напишем

$$|\psi_k>=\alpha\,|R_{НГ}>+\beta\,|L_{НД}>. \tag{16.72}$$

Операторът на четността, действувайки на това състояние, дава

$$\hat{P}\,|\psi_k>=\alpha\,|L_{НД}>+\beta\,|R_{НГ}>. \tag{16.73}$$

Това състояние съвпада с $\pm|\psi_k>$ или при $\beta=\alpha$, или при $\beta=-\alpha$. Така че крайното състояние с положителна четност е

$$|\psi_k^+>=\alpha\{|R_{НГ}>+|L_{НД}>\}, \tag{16.74}$$

а състоянието с отрицателна четност е

$$|\psi_k^->=\alpha\{|R_{НГ}>-|L_{НД}>\}. \tag{16.75}$$

По-нататък ние искаме да разгледаме разпад на възбудено състояние с отрицателна четност на основно състояние с положителна четност и на фотон. Ако четността се запазва, крайното състояние на фотона трябва да има отрицателна четност. Той трябва да бъде в състоянието (16.75). Ако амплитудата за това, че ще бъде открито състоянието $|R_{НГ}>$ е α, амплитудата за това, че ще бъде открито $|L_{НД}>$, е $-\alpha$.

Сега обърнете внимание, какво ще се получи, ако ние осъществим завъртане на 180° около оста y. Началното възбудено състояние на атома се превръща в състояние с $m=-1$ (съгласно табл. 15.2 на стр. 260 знакът не се изменя). А завъртането на крайното състояние дава

$$R_y(180°)\,|\psi_k^->=\alpha\{|R_{НД}>-|L_{НГ}>\}. \tag{16.76}$$

Като сравним това с (16,75), виждаме, че при избраната от нас четност на крайното състояние амплитудата за това, че при начално състояние $m=-1$ ще се получи ляв фотон, разпространяващ се по оста $+z$, е равна със знак минус на амплитудата за това, че при начално състояние $m=+1$ ще се получи десен фотон, разпространяващ се по оста $-z$. Това се съгласува с резултатите, получени в § 1.

17

Атом на водорода и периодична таблица

17-1. Уравнение на Шрьодингер за водородния атом

17-2. Решения със сферична симетрия

17-3. Състояния с ъглова зависимост

17-4. Общо решение за водорода

17-5. Вълнови функции на водорода

17-6. Периодична таблица

17-1. Уравнение на Шрьодингер за водородния атом

Най-забележителният успех в историята на квантовата механика е обясняването на всички детайли в спектрите на най-простите атоми, а също тъй периодичностите, забелязани в таблицата на химичните елементи. В тази глава на нашия курс по квантова механика ние най-после ще стигнем до това изключително постижение и ще разкажем как се обяснява спектърът на водорода. Освен това тук ние ще разкажем и за качественото обяснение на тайнствените свойства на химичните елементи. Затова ние ще изучим подробно поведението на електрона в атома на водорода: най-напред ще пресметнем неговото разпределение в пространството, следвайки представите, които бяха развити в гл. 14.

За получаване на пълно описание на атома на водорода би трябвало да се вземат под внимание движенията на двете частици — както на протона, така и на електрона. При решаването на тази задача в квантовата механика се използува класическата идея за описание движението на всяка от частиците спрямо техния общ център на тежестта. Ние обаче няма да правим това, а ще използуваме приближението, в което се счита, че протонът е много тежък, толкова тежък, че той може да се приеме като закрепен неподвижно в центъра на атома.

Ще направим и друго приближение: ще забравим, че електронът има спин и това, че той трябва да се описва по законите на релативистичната механика. Това изисква внасянето на малки поправки в нашите изчисления, тъй като ние ще използуваме нерелативистичното уравнение на Шрьодингер и ще пренебрегнем магнитните ефекти. Малки магнитни ефекти се появяват поради това, че протонът от гледна точка на електрона е циркулиращ по кръг заряд, който създава магнитно поле. В това поле енергията на електрона ще бъде различна в зависимост от това, накъде е насочен неговият спин — по или срещу полето. Енергията на атома трябва да се отмести малко по отношение на тази величина, която ние ще изчислим. Но ние ще пренебрегнем това слабо отместване на енергията, т. е. ще си мислим, че електронът съвсем прилича на пумпал, който се движи в пространството по кръг, запазвайки през цялото време една и съща посока на своя спин. Тъй като става дума за свободен атом в пространството, пълният момент на количеството на движение се запазва. В нашето приближение ще считаме, че моментът на количеството на движение, който е свързан със спина на електрона, остава неизменен, така че останалият момент на количеството на движение (това, което обикновено се нарича „орбитален“ момент на количеството на движение) също няма да се изменя. С много добро приближение може да се счита, че електронът се движи в атома на водорода като частица без спин — неговият орбитален момент на количестото на движение е постоянен.

В тези приближения амплитудата за това, че електронът ще бъде намерен в атома или на друго място в пространството, може да бъде представена като функция на положението на електрона в пространството и времето. Да означим с $\psi(x, y, z, t)$ амплитудата за това, че електронът ще бъде намерен в точка x, y, z в момент t. Съгласно квантовата механика скоростта на изменение на тази амплитуда с течение на времето се дава от оператора на Хамилтон, действуващ на същата тази функция.

От гл. 14 ние знаем, че

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{\mathscr{H}} \psi, \tag{17.1}$$

където

$$\hat{\mathscr{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}). \tag{17.2}$$

Тук m е масата на електрона, а $V(\mathbf{r})$ — неговата потенциална енергия в електростатичното поле на протона. Считайки, че $V=0$ на големи разстояния от протона, можем да пишем[1]

$$V = -\frac{e^2}{r}.$$

Вълновата функция ψ тогава трябва да удовлетворява уравнението

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - \frac{e^2}{r} \psi. \tag{17.3}$$

Ние искаме да намерим състояния с определена енергия, затова ще опитаме да потърсим решения, които биха имали вида

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-(i/\hbar)\, Et}\, \psi(\mathbf{r}). \tag{17.4}$$

Тогава функцията $\psi(\mathbf{r})$ трябва да бъде решение на уравнението

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = \left(E + \frac{e^2}{r}\right) \psi, \tag{17.5}$$

където E е някаква константа (енергия на атома).

Тъй като потенциалната енергия зависи само от радиуса, по-добре е това уравнение да се реши в полярни координати.

В правоъгълни координати лапласианът се дефинира така:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Вместо това ние искаме да използуваме координатите r, θ, φ, представени на фиг. 17. 1. Те са свързани с x, y, z посредством формулите

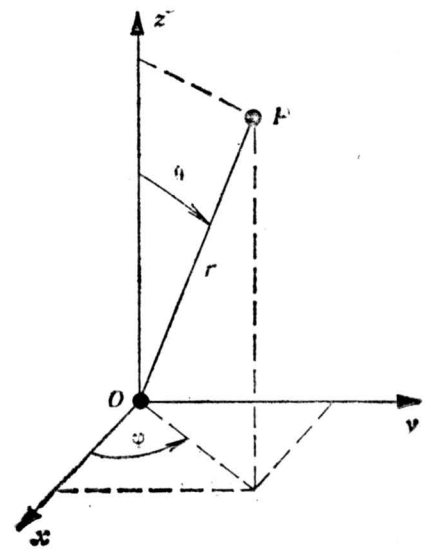
$$x = r \sin\theta \cos\varphi;\quad y = r \sin\theta \sin\varphi;\quad z = r \cos\theta.$$

Очакват ви доста дълги алгебрични пресмятания, но в края на краищата вие ще можете да покажете, че за произволна функция $f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r}, \theta, \varphi)$ е в сила равенството

$$\nabla^2 f(r,\theta,\varphi) = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (rf) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial f}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2} \right\}. \tag{17.6}$$

Ако в полярни координати уравнението, което функцията $\psi(r, \theta, \varphi)$ трябва да удовлетворява, приема вид

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\psi) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial\psi}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} \right\} = -\frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi. \tag{17.7}$$



Фиг. 17.1. Сферични координати r, θ, φ на точката P

17-2. Решения със сферична симетрия

Най-напред ще се опитаме да намерим някаква по-проста функция, удовлетворяваща уравнението (17.7). Макар че вълновата функция ψ в общия случай ще зависи както от θ и φ, така и от r, все пак можем да се опитаме да потърсим няма ли такъв особен случай, когато ψ не зависи от ъглите. Ако вълновата функция не зависи от ъглите, при въртене на координатната система нито

[1] Както обикновено, $e^2 = q_e^2/4\pi\varepsilon_0$.

една от амплитудите няма да се изменя. Това означава, че всички компоненти на момента на количеството на движението са равни на нула. Такава функция ψ би съответствувала на състояние с равен на нула момент на количеството на движение. (Разбира се, всъщност е равен на нула само орбиталният момент на количеството на движение, защото остава още спинът на електрона, но ние не обръщаме внимание на тази част от момента.) Състоянието с нулев орбитален момент на количеството на движение има особено название. То се нарича „s-състояние“ (можете да считате, че s произлиза от думата „сферично симетричен“)[1].

Щом ψ не трябва да зависи от θ и φ в пълния лапласиан остава само първият член и (17.7) силно се опростява

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\psi) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E+\frac{e^2}{r}\right)\varphi. \tag{17.8}$$

Преди да се заемем с решаването на това уравнение, добре би било, изменяйки мащаба, да се освободим от константите $e^2, m, \hbar$. С това пресмятанията ще се облекчат. Ако направим замяна на променливите r и E съгласно формулите

$$r=\frac{\hbar^2}{me^2}\rho, \tag{17.9}$$

$$E=\frac{me^4}{2\hbar^2}\varepsilon, \tag{17.10}$$

уравнението (17.8) приема вида (след умножаване с ρ)

$$\frac{d^2(\rho\psi)}{d\rho^2} = -\left(\varepsilon+\frac{2}{\rho}\right)\rho\psi. \tag{17.11}$$

Тези изменения на мащаба означават, че ние измерваме разстоянието r и енергията E в „естествени“ атомни единици. Например $\rho=r/r_B$, където $r_B=\hbar^2/me^2$ се нарича „боровски радиус“, който е равен примерно на 0,528 Å. Аналогично $\varepsilon=E/E_R$, където $E_R=me^4/2\hbar^2$. Тази енергия се нарича „ридберг“ и е равна примерно на 13,6 eV. Щом в уравнението участвува и навсякъде произведението $\rho\psi$, по-добре е да работим с него, отколкото с ψ. Въвеждаме означението

$$\rho\psi=f \tag{17.12}$$

и получаваме уравнението

$$\frac{d^2f}{d\rho^2} = -\left(\varepsilon+\frac{2}{\rho}\right)f \tag{17.13}$$

за f, което изглежда по-просто.

Сега ни предстои да намерим функцията f, която удовлетворява уравнението (17.13), с други думи, просто да решим диференциалното уравнение. За съжаление не съществуват никакви пригодни за всички случаи в живота методи за решаване на кое да е диференциално уравнение. Вие просто сте длъжни да опитвате ту едно, ту друго решение. Макар че уравнението не е от лесните, все пак хората са забелязали, че то може да се реши с помощта на следната процедура. Най-напред вие замествате f, което е функция на ρ, с произведение на две функции

$$f(\rho)=e^{-\alpha\rho}g(\rho). \tag{17.14}$$

Това просто означава, че вие отделяте от $f(\rho)$ множителя $e^{-\alpha\rho}$. Това може да се направи за всяка функция $f(\rho)$. Задачата сега се свежда до намиране на подходяща функция $g(\rho)$.

Като заместим (17.14) в (17.13), ще получим следното уравнение за g:

[1] Тъй като това и други някои особени наименования са част от общоприетия речник на атомната физика, вие трябва просто да ги научите. Ние ще ви помогнем да ги запомните, помествайки в тази глава малко „речниче“ на подобните термини.

$$\frac{d^2g}{d\rho^2} - 2\alpha\frac{dg}{d\rho} + \left(\frac{2}{\rho} + \varepsilon + \alpha^2\right)g = 0. \qquad (17.15)$$

Ние имаме право да изберем произволно α, затова ще направим така, че да имаме

$$\alpha^2 = -\varepsilon; \qquad (17.16)$$

тогава получаваме

$$\frac{d^2g}{d\rho^2} - 2\alpha\frac{dg}{d\rho} + \frac{2}{\rho}g = 0. \qquad (17.17)$$

Може да си помислите, че ние не сме се отдалечили много от уравнението (17.13); но новото уравнение е хубаво с това, че то може лесно да се реши, като $g(\rho)$ се разложи в ред по ρ. По принцип уравнението (17.13) може да се реши по същия начин, но при него това става по-сложно. Ние твърдим, че уравнението (17.17) може да бъде удовлетворено от някаква функция $g(\rho)$, която се записва във вид на следния ред:

$$g(\rho) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k \rho^k, \qquad (17.18)$$

където a_k са постоянни коефициенти. И на нас ни остава да намерим само подходяща редица от коефициенти! Да проверим годно ли е така записаното решение. Първата производна на функцията (17.18) е

$$\frac{dg}{d\rho} = \sum_{k=1}^{\infty}{}' a_k k \rho^{k-1},$$

а втората

$$\frac{d^2g}{d\rho^2} = \sum_{k=1}^{\infty}{}' a_k k (k-1) \rho^{k-2}.$$

Заместваики тези производни в (17.17), получаваме

$$\sum_{k=1}^{\infty} k(k-1) a_k \rho^{k-2} - \sum_{k=1}^{\infty} 2\alpha\, k a_k \rho^{k-1} + \sum_{k=1}^{\infty} 2a_k \rho^{k-1} = 0. \qquad (17.19)$$

Все още не е ясно дали ще излезе нещо от това, но ние продължаваме да вървим по-нататък. Всичко би изглеждало по-добре, ако заменим първата сума с неин еквивалент. Първият член в тази сума е равен на нула, затова всяко k може да се замени с $k+1$; от това нищо няма да се измени в безкрайния ред. Следователно ние имаме право да напишем първата сума така:

$$\sum_{k=1}^{\infty} (k+1)\, k a_{k+1} \rho^{k-1}.$$

Сега можем да обединим трите суми под един знак

$$\sum_{k=1}^{\infty} \left[(k+1)k\, a_{k+1} - 2\alpha\, k a_k + 2a_k\right] \rho^{k-1} = 0. \qquad (17.20)$$

Този степенен ред трябва да се обръща в нула за всички мислими стойности на ρ, което е възможно само тогава, когато коефициентите при всяка степен на ρ поотделно са равни на нула. Ние ще получим решение за водородния атом, ако намерим такава редица a_k, за която

$$(k+1)\, k a_{k+1} - 2(\alpha k - 1) a_k = 0 \qquad (17.21)$$

при всички $k \geq 1$. Това може лесно да се нагласи. Изберете каквото

и да е a_1. След това образувайте всички останали коефициенти с помощта на формулата

$$a_{k+1} = \frac{2(\alpha k-1)}{k(k+1)}\ a_k\ . \tag{17.22}$$

Използувайки тази формула, вие ще получите a_2, a_3, a_4 и т. н. и, разбира се, всяка двойка ще удовлетворява (17.21). Така ние ще получим ред за $g(\rho)$, който удовлетворява (17.17). С негова помощ ние ще напишем ψ-решението на уравнението на Шрьодингер. Обърнете внимание, че решенията зависят от това, какво е предполагаемата енергия (посредством α), но за всяка стойност на ε се получава съответен ред.

Решение ние имаме, но какво представлява то физически? За това можем да получим идея, като погледнем какво става далеч от протона — при големи ρ. Там основно значение придобиват членовете на реда от най-високи степени, т. е. трябва да видим какво става при големи k. Когато $k \gg 1$, уравнението (17.22) приблизително съвпада с

$$a_{k+1} = \frac{2\alpha}{k}\ a_k\ ,$$

а това означава, че

$$a_{k+1} \approx \frac{(2\alpha)^k}{k!}\ . \tag{17.23}$$

Но това са точно коефициентите на разложението в ред на $e^{+2\alpha\rho}$. Функцията g се оказва бързо растяща експонента. Даже след умножаването ѝ с $e^{-\alpha\rho}$ получената функция $f(\rho)$ [вж. (17.14)] при големи ρ ще се изменя като $e^{\alpha\rho}$. Ние намерихме математическо решение, но то няма физически смисъл. То представя случай, когато е най-малко *вероятно* електронът да се окаже близо до протона. Много по-често вие ще го намерите на големи разстояния ρ. А вълновата функция за *свързан* електрон трябва да се стреми към нула при големи стойности на ρ.

Налага се да помислим за това не може ли някак да се надхитри това решение. Оказва се, че може. Погледнете! Ако за щастие би се оказало, че $\alpha = \frac{1}{n}$, където n е произволно цяло число, уравнението (17.22) би довело до условието $a_{n+1}=0$. И всички висши членове биха се обърнали също в нула. Би се получил не безкраен ред, а краен полином. Всеки полином расте по-бавно от $e^{\alpha\rho}$, затова множителят $e^{-\alpha\rho}$ сигурно ще го преодолее при големи ρ и функцията f за такива стойности на ρ ще се стреми към нула. Единствените решения *за свързаните състояния* са тези, за които $\alpha = \frac{1}{n}$ при $n=1, 2, 3, 4$ и т. н.

Връщайки се назад към уравнението (17.16), ние виждаме, че за сферично симетричното вълново уравнение могат да съществуват решения за свързаните състояния само при енергии

$$-\varepsilon = 1,\ \frac{1}{4},\ \frac{1}{9},\ \frac{1}{16},\ \ldots,\ \frac{1}{n^2},\ \ldots\ .$$

Допустими са само онези енергии, които представляват именно такава част от ридберга $E_R = me^4/2\hbar^2$, т. е. енергията на n-тото ниво е равна на

$$E_n = -E_R \frac{1}{n^2}\ . \tag{17.24}$$

Впрочем нищо мистично няма в отрицателните стойности на енергията. Те са отрицателни просто, поради това че когато решихме да пишем $V = -\frac{e^2}{r}$, ние по този начин избрахме за нулева енергията на електрона, намиращ се на много голямо разстояние от протона. Когато той е по-близо, неговата енергия е по-малка, т. е. под нулата. Енергията е най-ниска (с най-голяма отрицател-

на стойност) при $n=1$ и нараства до нула с нарастването на n.

Още до откриването на квантовата механика експерименталното изучаване на водородния спектър е показало, че енергетичните нива се описват с формулата (17.24), където E_R, както това следва от измерванията, е равно примерно на 13,6 eV. След това Бор предложил модел, който довел до същото уравнение (17.24), и предсказал, че E_R трябва да е равно на $me^4/2\hbar^2$. Първият голям успех на теорията на Шрьодингер се състои в това, че тя възпроизвежда този резултат направо от основното уравнение на движението на електрона.

Сега, след като решихме задачата за нашия първи атом, нека разгледаме свойствата на полученото решение. Обединяваме всички отделили се в процеса на решаването фактори и получаваме окончателния вид на решението

$$\psi_n = \frac{f_n(\rho)}{\rho} = \frac{e^{-\rho/n}}{\rho} g_n(\rho), \tag{17.25}$$

където

$$g_n(\rho) = \sum_{k=1}^{n} a_k \rho^k \tag{17.26}$$

и

$$a_{k+1} = \frac{2(k/n-1)}{k(k+1)} a_k . \tag{17.27}$$

Докато ние се интересуваме главно от относителната вероятност да открием електрона на едно или друго място, в качеството на a_1 можем да избираме кое да е число. Да вземем например $a_1=1$. (Обикновено избират a_1 така, че вълновата функция да е „нормирана“, т. е. пълната вероятност за намиране на електрона където и да е в атома да е равна на единица. Ние сега нямаме нужда от това.)

В най-ниското енергетично състояние $n=1$ и

$$\psi_1(\rho) = e^{-\rho}. \tag{17.28}$$

Ако атомът на водорода се намира в своето основно (най-ниско енергетично) състояние, амплитудата за това, че електронът ще бъде намерен на някакво място, намалява експоненциално с разстоянието до протона. Най-вероятно е той да се намира съвсем близо до протона. Характерното разстояние, на което той може да се окаже, е около едно ρ, или един боровски радиус r_B.

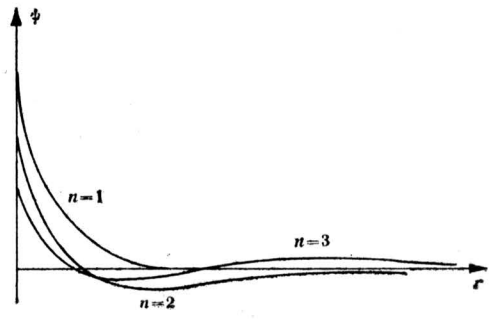
Полагайки $n=2$, получаваме следващото по-високо ниво. Във вълновата функция на това състояние влизат два члена. Тя е равна на

$$\psi_2(\rho) = \left(1 - \frac{\rho}{2}\right) e^{-\rho/2}. \tag{17.29}$$

Вълновата функция за следващото ниво е

$$\psi_3(\rho) = \left(1 - \frac{2\rho}{3} + \frac{2}{27}\rho^2\right) e^{-\rho/2}. \tag{17.30}$$

Тези три вълнови функции са начертани на фиг. 17.2. Общата тенденция вече се вижда. Всички вълнови функции при големи стойности на ρ след няколко осцилации бързо се приближават към нула. И наистина броят на „изгъванията“ на функцията ψ_n е равен точно на n, или все едно броят на пресечните точки с абсцисната ос — броят на нулите — е равен на $n-1$.



Фиг. 17.2. Вълновите функции на трите първи състояния на водородния атом с $l=0$. Мащабите са избрани така, че пълните вероятности да съвпадат

17-3. Състояния с ъглова зависимост

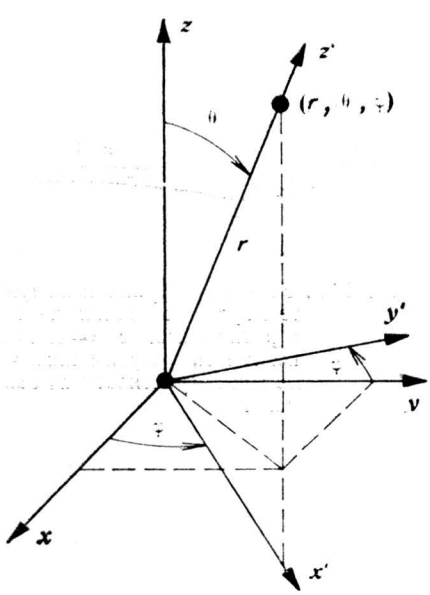
Ние намерихме, че в състоянията, описани от вълновата функция $\psi_n(r)$, амплитудата на вероятността за намиране на електрони някъде има сферична симетрия; тя зависи само от r—разстоянието до протона. Моментът на количеството на движение в тези състояния е равен на нула. Сега да се заемем със състоянията, които имат някакъв момент на количеството на движение.

Би могло, разбира се, просто да се изследва чисто математическата задача за намиране на такава функция на r, θ и φ, която удовлетворява диференциалното уравнение (17.7), добавяйки само физическото условие, че единствено приемливи за нас функции са тези, които при големи r се стремят към нула. Така постъпват почти винаги. Но ние ще се опитаме да скъсим нашия път и да се възползуваме от онова, което вече знаем, а именно, че ни е известно как амплитудите зависят от пространствените ъгли.

Атомът на водорода в едно или в друго състояние е частица с определен „спин" j-квантово число на пълния момент на количеството на движение. Една част на този спин възниква благодарение на собствения спин на електрона, а останалата — благодарение на движението на електрона. Тъй като всяка от тези части действува (в много добро приближение) независимо, ние както преди ще игнорираме спиновата част и ще вземаме под внимание само „орбиталния" момент. Впрочем това орбитално движение е съвсем подобно на спина. Ако да речем орбиталното квантово число е l, z-компонентата на момента на количеството на движение може да бъде l, $l-1$, $l-2$, . . . ,$-l$. (Ние както обикновено измерваме всичко в единици $\hbar$.) Освен това както преди могат да се използуват всички наши матрици на въртене и останалите известни свойства. (От това място нататък ние *наистина* започваме да пренебрегваме спина на електрона; говорейки за момента на количеството на движение, ние ще имаме пред вид само неговата орбиталната част.)

Тъй като полето с потенциал V, в което се движи електронът, зависи само от r, а не от θ и φ, хамилтонианът е симетричен относно всяко въртене. Оттук следва, че и моментът на количеството на движение, и всички негови проекции се запазват. Това не е особено свойство на кулоновия потенциал e^2/r; то се проявява при движение в *произволно* „централно поле" — поле, зависещо само от r.

Да си представим някакво възможно състояние на електрона; вътрешната ъглова структура на това състояние ще се определя от квантовото число l. В зависимост от „ориентацията" на пълния момент на количеството на движение относно оста z неговата проекция m върху оста z може да е равна на някое от възможните $2l+1$ цели числа между $+l$ и $-l$. Нека например $m=1$. С каква амплитуда електронът ще се окаже на оста z на разстояние r от началото? С нулева. Електронът *не може* да има на оста какъвто и да е орбитален момент относно тази ос. Но нека тогава имаме $m=0$. Това е друго нещо; сега вече може да се появи отлична от нула амплитуда за това, че електронът ще се окаже на оста z на някакво разстояние от протона. Да означим тази амплитуда с $F_l(r)$. Това е амплитудата за намиране на електрона на разстояние r по оста z, когато атомът се намира в състояние $|l, 0>$, т. е. в състояние с орбитален момент l и z-компонента на момента $m=0$.



Фиг. 17.3. Точката (x, y, z) лежи на оста z' на координатната система x', y', z'

А щом ни е известна функцията $F_l(r)$, всичко ни е известно. Сега вече за произволно състояние $|l, m>$ можем да узнаем амплитудата $\psi_{l,m}(r)$ за това, че електронът ще се намира на *произволно място* в атома. Как ще узнаем това? Следете. Нека имаме атом в състояние $|l, m>$. Каква е амплутадата за това, че електронът ще се намира под ъгъл θ, φ и на разстояние r от началото? Прекарайте нова ос z, да речем z', под този ъгъл (фиг. 17.3) и си задайте въпроса: каква е амплитудата за това, че електронът ще се окаже на новата ос z' на разстояние r? Ние знаем, че той не може да се окаже на оста z' само ако m' — неговата z'-компонента на момента на количеството на движение — не е равна на нула. Когато $m'=0$, то амплитудата за това, че електронът ще се намира на оста z', е $F_l(r)$. Следователно резултатът ще се получи чрез умножаване на две амплитуди. Първата е амплитудата за това, че атомът, намиращ се в състояние $|l, m>$ относно оста z ще се окаже в състояние $|l, m'=0>$ *относно оста* z'. Умножете тази амплитуда на $F_l(r)$ и ще получите амплитудата $\psi_{l,m}(r)$ за това, че електронът ще бъде намерен в точ-

ката (r, θ, φ) относно първоначалната координатна система.

Нека да напишем всичко това с формули. Трансформационните матрици на въртене са вече изчислени. За да се премине от системата x, y, z към x', y', z' (вж. фиг. 17.3), може най-напред да завъртим старата система около оста z на ъгъл φ, а след това да завъртим така получената система около новата ос y (оста y') на ъгъл θ. Общото въртене се дава от произведението

$$R_y(\theta)\, R_z(\varphi).$$

Амплитудата за това, че след въртенето ще имаме състоянието $|l, m'=0>$, е

$$<l, 0 \mid R_y(\theta)\ R_z(\varphi) \mid l, m>. \tag{17.31}$$

В крайна сметка получаваме

$$\psi_{l,m}(\mathbf{r}) = <l, 0 \mid R_y(\theta)\, R_z(\varphi) \mid l, m> F_l(r). \tag{17.32}$$

При орбиталното движение l може да приема само целочислени стойности. (Ако електронът може да бъде намерен в коя да е точка с $r \neq 0$, има някаква амплитуда за това, че за посоката към тази точка $m=0$. А състоянията с $m=0$ могат да се осъществят само за цели спинове.) Матриците на въртене за $l=1$ са приведени в табл. 15.2 (стр. 260). За големи l вие можете да използвате общите формули, изведени в гл. 16. Матриците $R_z(\varphi)$ и $R_y(\theta)$ са написани отделно, но вие знаете как да ги комбинирате. В общия случай вие започвате със състоянието $|l, m>$ и му действувате с оператора $R_z(\varphi)$, получавайки новото състояние $R_z(\varphi) \mid l, m>$ (което просто е равно на $e^{im\varphi} |l, m>$). След това действувате на така полученото състояние с оператора $R_y(\theta)$ и получавате състоянието $R_y(\theta) R_z(\varphi) \mid l, m>$. Като го умножите с $<l, 0|$, вие получавате матричния елемент (17.31).

Матричните елементи на операцията въртене са алгебрични функции на θ и φ. Всичките частни видове на функциите, които се появяват в (17.31), възникват и в много други задачи, свързани със сферични вълни. На тях им е дадено специално име. Вярно е, че не всички автори използуват едни и същи означения; най-често пишат

$$<l, 0 \mid R_y(\theta) R_z(\varphi) \mid l, m> \equiv a\, Y_{l,m}(\theta, \varphi). \tag{17.33}$$

Функциите $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ се наричат *сферични хармонични функции*, а a е просто числов множител, който зависи от това, как е определена функцията $Y_{l,m}$. При обикновеното определение

$$a = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}. \tag{17.34}$$

В тези означения вълновите функции на водорода се записват така:

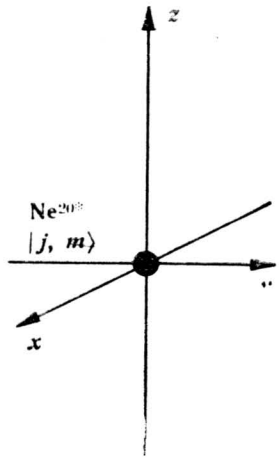
$$\psi_{l,m}(\mathbf{r}) = Y_{l,m}(\theta, \varphi) F_l(r). \tag{17.35}$$

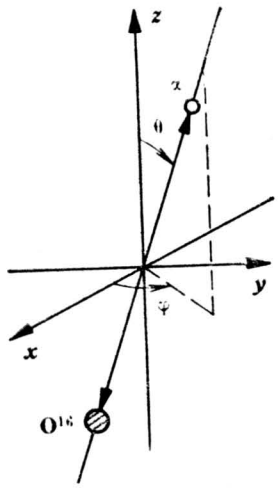
Ъгловите функции $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ са важни не само в много квантовомеханични задачи, но и в много области на класическата физика, в които се среща операторът ∇^2, например в електромагнетизма. Като друг пример ще разгледаме разпада на възбудено състояние на Ne^{20} (за който говорихме в предходната глава), което изпуска α-частица и се превръща в O^{16}:

$$Ne^{20*} \rightarrow O^{16} + He^4.$$

Да допуснем, че възбуденото състояние има спин l (непременно цял), а z-компонентата на момента на количеството на движение е m. Поставяме такъв въпрос: ако са дадени l и m, каква е амплитудата за това, че α-частицата ще излети в посока, сключваща ъгъл θ с оста z, и ъгъл φ с равнината xz (фиг. 17.4)?

[1] Сферични функции на Лаплас (бел. ред.).





Фиг. 17.4. Разпад на възбудено състояние Ne^{20}

Следното разсъждение ще ни помогне да решим тази задача. Разпадът, в който α-частицата излита по оста z, трябва да произлиза от състояние с $m=0$. Това е така, тъй като самата α-частица и O^{16} имат спин, равен на нула, а момент около дадена ос за сметка на движение по тази ос не може да се създаде. Да означим тази амплитуда с a (за единица телесен ъгъл). Тогава, за да намерим амплитудата на разпада под произволен ъгъл (вж. фиг. 17.4), остава само да се узнае с каква амплитуда даденото начално състояние може да има нулев момент спрямо посоката на разпада. Амплитудата за това, че разпадът се осъществява в посоката (θ, φ), тогава ще бъде равна на произведението на a и амплитудата за това, че състоянието $|l, m\rangle$ спрямо оста z ще се окаже състояние $|l, 0\rangle$ спрямо оста z' (посоката на разпада). Последната амплитуда е равна точно на израза (17.31). Вероятността да видим α-частицата под ъгъл (θ, φ) следователно е

$$P(\theta, \varphi)=a^2 \mid \langle l, 0 \mid R_y(\theta) R_z(\varphi) \mid l, m\rangle \mid^2.$$

За пример да разгледаме начално състояние с $l=1$ и различни m. От табл. 15.2 (стр. 260) ние знаем всичко необходимо за амплитудата:

$$\langle 1, 0 \mid R_y(\theta) R_z(\varphi) \mid 1, +1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\theta\, e^{i\varphi},$$

$$\langle 1, 0 \mid R_y(\theta) R_z(\varphi) \mid 1, 0\rangle = \cos\theta,$$

$$\langle 1, 0 \mid R_y(\theta) R_z(\varphi) \mid 1, -1\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin\theta\, e^{-i\varphi}. \qquad (17.36)$$

Това са трите възможни амплитуди на ъгловите разпределения в зависимост от това, какво е m за първоначалното ядро.

Такива амплитуди, като (17.36), се срещат толкова често и са така важни, че те са получили по *няколко* названия. Ако амплитудата на ъгловото разпределение е пропорционална на коя да е от тези три функции или на произволна тяхна линейна комбинация, ние казваме: „орбиталният момент на системата е равен на единица“. Или можем да кажем „Ne^{20} излъчва p-вълна“. Понякога говорят „α-частицата се излъчва в състояние с $l=1$“. Тъй като има много начини за изказване на едно и също нещо, полезно е да имаме речник на тези изрази. Ако искате да разбирате разговорите на физиците, вие просто трябва да научите техния език. В таблица 17.1 е приведен речник на орбиталните моменти на количеството на движение.

Ако орбиталният момент е равен на нула, при въртене на координатната система нищо не се изменя и в зависимост от ъгъла няма: зависимостта от ъгъла се дава от някаква константа, да речем 1. Това състояние се нарича „s-състояние“. Има само едно такова състояние, докато става дума само за ъглова зависимост. Ако орбиталният момент е равен на 1, зависимостта на амплитудата от ъглите може да се дава от една от трите приведени функции в зависимост от стойността на m или от тяхна определена линейна комбинация. Те се наричат „p-състояния“. Броят на тези състояния е три. Ако орбиталният момент е равен на 2, съответните функции са пет (вж. таблицата). Всяка тяхна линейна комбинация се нарича „$l=2$“—амплитуда или амплитуда на d-вълната“. Сега вие веднага се досещате каква ще бъде следващата буква. Какво идва след s, p, d? Разбира се, че f, g, h и т. н. по азбучен ред. Тези букви не означават нищо. [Някога те са означавали нещо: „рязка“ (scharp), „главна“ (principal), „дифузна“ (diffuse) и „фундаментална“ (fundumental) серия от линии на оптичния спектър на атомите. Но това е било тогава, когато още не е било известно откъде се вземат тези серии от спектрални линии. След f особени названия вече не е имало, така че ние сега просто продължаваме с g, h и т. н.]

Таблица 17.1

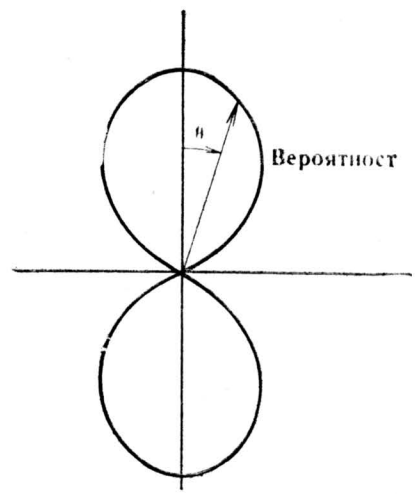
Речник на орбиталните моменти
($l=j$ — цели числа)

Орбитален момент l	z-компонента m	Ъглова зависимост на амплитудите	Наименование	Брой на състоянията	Орбитална четност
0	0	1	s	1	+
1	+1	$-\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\, e^{i\varphi}$	p	3	—
	0	$\cos\theta$			
	−1	$\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\, e^{-i\varphi}$			
2	+2	$\frac{\sqrt{6}}{4}\sin^2\theta e^{i2\varphi}$	d	5	+
	+1	$\frac{\sqrt{6}}{2}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\varphi}$			
	0	$\frac{1}{2}(3\cos^2\theta-1)$			
	−1	$-\frac{\sqrt{6}}{2}\sin\theta\cos\theta\, e^{-i\varphi}$			
	−2	$\frac{\sqrt{6}}{4}\sin^2\theta\, e^{-i2\varphi}$			
3		$<l,\ 0 \mid R_y(\theta)\, R_z(\varphi) \mid l,\ m>$	f		
4		$=Y_{l,\,m}(\theta,\ \varphi)$	d	$2l+1$	$(-1)^l$
5		$=P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi}$	h		
.			.		
.			.		
.			.		

Ъгловите функции в таблицата вървят с няколко имена и се определят понякога с малки вариации в числовите множители, стоящи най-отпред. Понякога те се наричат „сферични хармонични функции“ и се означават с $Y_{l,m}(\cos\theta)$. Някога се записват във вида $P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi}$, а при $m=0$ просто $P_l(\cos\theta)$. Функциите $P_l(\cos\theta)$ се наричат „полиноми на Лежандър“ по $\cos\theta$, а функциите $P_l^m(\cos\theta)$ се наричат „присъединени функции на Лежандър“. Таблици на тези функции могат да бъдат намерени в много книги.

Обърнете внимание, че всички функции с дадено l имат една и съща четност — при нечетни l те изменят своя знак при инверсия, при четни l не го изменят. Затова казваме, че четността на състояние с орбитален момент l е равна на $(-1)^l$.

Както видяхме, едни и същи ъглови разпределения могат да се отнасят за различни неща: за ядрен разпад, за други ядрени процеси, за разпределение на амплитудите за намиране на електрона на едно или друго място в атома на водорода. Например, ако електронът се намира в p-състояние ($l=1$), амплитудата за това, че той ще се намира на някакво място, представлява линейна комбинация на трите функции за $l=1$ от табл. 17.1. Да вземем интересния случай $\cos\theta$. Той означава например, че амплитудата е положителна в горната част ($\theta<\pi/2$), отрицателна — в долната ($\theta>\pi/2$) и е равна на нула при $\theta=90°$. Повдигайки я в квадрат, виждаме, че вероятността за намиране на електрона се изменя с θ така, както е показано на фиг. 17.5, и не зависи от φ. Такова ъглово разпределение е причина за това, че в молекулната връзка привличането на електрони в състояние с $l=1$ от другия атом зависи от посоката. Оттук води началото си насочената валентност на химическото привличане.



Фиг. 17.5. Графика на функцията $\cos^2\theta$ в полярни координати, която дава относителната вероятност за намиране на електрона под различните ъгли спрямо оста z (при дадено r) в състояние на атома с $l=1$ и $m=0$

17-4. Общо решение на водорода

Във формула (17.35) ние написахме вълновите функции на водородния атом във вида

$$\psi_{l,m}(\mathbf{r}) = Y_{l,m}(\theta, \varphi) F_l(r). \tag{17.37}$$

Тези вълнови функции трябва да бъдат решения на диференциалното уравнение (17.7). Да видим какво означава това. Заместваме (17.37) в (17.7); получаваме

$$\frac{Y_{l,m}}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2}(rF_l) + \frac{F_l}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial Y_{l,m}}{\partial\theta}\right) + \frac{F_l}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y_{l,m}}{\partial\varphi^2}$$
$$= -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right) Y_{l,m} F_l. \tag{17.38}$$

Да умножим всичко с r/F_l и да групираме членове; резултатът ще бъде такъв

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial Y_{l,m}}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial^2 Y_{l,m}}{\partial\varphi^2}$$
$$= -\left[\frac{r^2}{F_l}\left\{\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(rF_l) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{l^2}{r^2}\right)\right\}\right] Y_{l,m}. \tag{17.39}$$

Лявата част на това уравнение зависи от θ и φ, а от r *не зависи* Каквато и стойност да вземем за r, лявата част остава една и съща. Следователно *същото трябва да е изпълнено и за дясната част.* Въпреки че в израза в квадратните скоби тук-таме се среща величината r, той като цяло не може да зависи от r, иначе не би се получило уравнение, което е валидно за всички стойности на r. Освен това, както виждате, тази скобка не зависи нито от θ, нито от φ. Тя трябва да бъде равна на константа. Стойността на тази константа обаче може да зависи от стойността на l за това състояние, което ние изучаваме, тъй като функцията F_l принадлежи на това състояние; затова константата ще означим с K_l. Следователно уравнението (17.35) е еквивалентно на двете уравнения

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial Y_{l,m}}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2 Y_{l,m}}{\partial\varphi^2} = -K_l Y_{l,m} \tag{17.40}$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial r^2}(rF_l) + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E + \frac{l^2}{r}\right) F_l = K_l \frac{F_l}{r^2}. \tag{17.41}$$

Сега да погледнем това, което направихме. За всяко състояние, описвано от числата l и m, ние знаем функциите $Y_{l,m}$; тогава можем да определим K_l от уравнението (17.40). След това, заместваики K_l в (17.41), ние ще получим диференциално уравнение за функцията $F_l(r)$. Ако съумеем да го решим, всички множители, влизащи в (17.37), ще ни станат известни и ние ще узнаем $\psi(\mathbf{r})$.

На какво е равна константата K_l? Обърнете внимание, че за всички m (които вървят с даденото l) тя трябва да бъде една и съща, затова ние имаме право да изберем в $Y_{l,m}$ стойността на m по желание и да я заместим в (17.40). Може би най-просто е да вземем $Y_{l,l}$. Уравнението (16.24) за този случай е

$$R_z(\varphi) \mid l, l\rangle = e^{il\varphi} \mid l, l\rangle. \tag{17.42}$$

Матричният елемент $R_y(\theta)$ е също много прост:

$$\langle l, 0 \mid R_y(\theta) \mid l, l\rangle = b(\sin\theta)^l, \tag{17.43}$$

където b е някакво число[1].

[1] Това се извежда лесно от (16.35). Но то може да бъде изведено и от основните принципи, като се използуват идеите, изложени в гл. 16, § 4. Състоянието $\mid l, l\rangle$ може да бъде съставено от $2l$ частици със спин $1/2$, който е ориентиран нагоре за всички частици, в състоянието $\mid l, 0\rangle$ l спина са ориен-

Обединявайки тези две равенства, получаваме

$$Y_{l,\,l} \sim e^{il\varphi} \sin^l \theta. \tag{17.44}$$

Заместването на тази функция в (17.40) дава

$$K_l = l(l+1). \tag{17.45}$$

Сега, след като определихме K_l, уравнението (17.41) ни дава радиалната функция $F_l(r)$. Това разбира се е точно уравнението на Шрьодингер, в което ъгловата част е заместена с нейния еквивалент $K_l F_l/r^2$. Нека да препишем (17.41) в тази форма, в която писахме уравнението (17.8):

$$\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r F_l) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left\{E + \frac{e^2}{r^2} - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}\right\} F^l(r). \tag{17.46}$$

Към потенциалната енергия се появи някаква тайнствена добавка. Макар че тая добавка се появи на бял свят след дълга серия от математически стъпки, тя все пак има прост физически произход. Ние ще ви дадем идея за нейния произход с помощта на полукласически аргументи. След това тя вече няма да ви изглежда така тайнствена.

Да си представим класическа частица, която се върти около някакъв силов център. Пълната енергия се запазва и е сума на потенциалната и кинетичната енергия

$$U = V(r) + \frac{1}{2}mv^2 = \text{const}.$$

В общия случай v се разлага на радиална компонента v_r и на тангенциална компонента $r\dot{\theta}$, т. е.

$$v^2 = v_r^2 + (r\dot{\theta})^2.$$

Моментът на количеството на движение $mr^2\dot{\theta}$ също се запазва; нека той да е равен на L. Тогава можем да напишем

$$mr^2\dot{\theta} = L \quad \text{или} \quad r\dot{\theta} = \frac{L}{mr},$$

т. е. енергията е равна на

$$U = \frac{1}{2}mv_r^2 + V(r) + \frac{L^2}{2mr^2}.$$

Ако нямаше момент на количеството на движението, биха останали само двата първи члена. Добавянето на момента на количеството на движението L изменя енергията точно тъй, както ако към потенциалната енергия би се добавил членът $L^2/2mr^2$. Но той почти точно съвпада с добавката в (17.46). Единствената разлика е в това, че вместо очаквания числител $l^2\hbar^2$ (това би могло да се очаква) се появява комбинацията $l(l+1)\hbar^2$. Но ние още порано видяхме [например в гл. 34, § 7, (том II)], че това е обикновена замяна, до която се налага да прибегнем, ако искаме квазикласическите разсъждения да съвпадат с правилното квантовомеханично пресмятане. Затова ние можем да си мислим за новия член като за някакъв „потенциал", определящ „центробежната сила" и възникващ в уравненията за радиалното движение на въртяща се система [вж. гл. 12, § 5 (том I)].

Сега ние вече можем да решим уравнението (17.46) относно $F_l(r)$. То много прилича на (17.8), така че ще прибегнем до същата техника. Всичко се повтаря до уравнението (17.19), в което ще се появи добавъчният член

тирани нагоре и l — надолу. При завъртане амплитудата за това, че спинът ще остане същият, е равна на $\cos\theta/2$, амплитудата за това, че той ще измени ориентацията си, е равна на $\sin\theta/2$. Интересува ни само това, че l спина няма да изменят ориентацията си, а останалите l ще я изменят. Амплитудата за това е равна на $(\cos\theta/2 \sin\theta/2)^l$, а това е също като $\sin^l\theta$.

$$-l(l+1)\sum_{k=0}^{\infty} a_k \rho^{k-2}. \tag{17.47}$$

Той може да се напише още така

$$-l(l+1)\left\{\frac{a_1}{\rho}-\sum_{k=1}^{\infty} a_{k+1}\,\rho^{k-1}\right\}. \tag{17.48}$$

(Ние сме отделили първия член, а след това сме отместили индекса k с единица.) Вместо (17.20) сега се получава

$$\sum_{k=1}^{\infty}[\{k(k+1)-l\ (l+1)\}\,a_{k+1}-2(\alpha k-1)\,a_k]\,\rho^{k-1}$$

$$-\frac{l(l+1)}{\rho}\,a_1=0. \tag{17.49}$$

Тъй като имаме само един член с ρ^{-1}, той трябва да е равен на нула. Коефициентът a_1 следователно е равен на нула (при условие, че l не е равно на нула, но тогава ние стигаме до нашето предишно решение). А когато всички квадратни скобки се приравнят на нула за произволни k, то и всички следващи членове ще станат равни на нула. При това условие (17.21) ни дава

$$a_{k+1}=\frac{2(\alpha k-1)}{k(k+1)-l(l+1)}\,a_k. \tag{17.50}$$

Това е единственото съществено видоизменение в сравнение със сферично симетричния случай.

Както и преди, редът трябва да се прекъсне, ако искаме решенията да описват свързани електрони. Ако $\alpha n=1$ редът се прекъсва при $k=n$. Условието за α се получава съвсем същото: α трябва да бъде равно на $\frac{1}{n}$, където n е цяло число. Обаче (17.50) води и до ново ограничение. Индексът k не може да бъде равен на l, в противен случай знаменателят се обръща в нула, а a_{k+1} — в безкрайност. С други думи, тъй като $a_1=0$, то (17.50) означава, че всички последователни коефициенти a_k се обръщат в нула, докато не дойдем до n_{l+1}, което може и да не е нула. Това означава, че числата k трябва да започват с $l+1$ и да завършват с n.

Окончателният резултат е такъв: при всяко l има набор от всевъзможни решения, които ние ще означаваме с $F_{n,l}$, а $n\geqslant l+1$. Всяко решение има енергия

$$E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2}\left(\frac{1}{n^2}\right). \tag{17.51}$$

Вълновата функция на състоянието с такава енергия и с ъглови квантови числа l и m има вид

$$\psi_{n,l,m}=Y_{l,m}(\theta,\ \varphi)\,F_{n,l}(\rho), \tag{17.52}$$

където

$$\rho\,F_{n,l}(\rho)=e^{-\alpha\rho}\sum_{k=l+1}^{n} a_k\rho^k. \tag{17.53}$$

Коефициентите a_k се получават от (17.50). Ние разполагаме най-после с пълно описание на водородния атом.

17-5. Вълнови функции на водорода

Да видим сега какво сме открили. Състоянията, които удовлетворяват уравнението на Шрьодингер за електрона в кулоново поле, се характеризират с три (при това цели) квантови числа: n, l, m. Ъгловото разпределение на амплитудата на електрона може да има само определени форми, които ние означаваме с $Y_{l,m}$. Те се номерират с l — *квантовото число на пълния момент* на

количеството на движение и m—„магнитното“ квантово число, което може да се изменя от $-l$ до $+l$. При всяка ъглова конфигурация са възможни различни радиални разпределения $F_{n,l}(r)$ на амплитудата на електрона; те се номерират с *главното квантово число n*, което може да се изменя от $l+1$ до $+\infty$. Енергията на състоянието зависи само от n и расте с n.

Състоянието с най-ниска енергия (или основното) е *s*-състоянието. За него $l=0$, $n=1$ и $m=0$. То е „неизродено“: има само едно състояние с такава енергия, а неговата вълнова функция е сферично симетрична. Амплитудата за намиране на електрона достига своя максимум в центъра на атома за това състояние и монотонно намалява с отдалечаване от центъра. Тази амплитуда може схематично да се изобрази във вид на сферичка (фиг. 17.6,*а*).

Има и други s-състояния с по-големи енергии; за тях $n=2,3,4,\ .\ .\ .$ и $l=0$. На всяка енергия съответствува само едно състояние с $m=0$ и всички те са сферично симетрични. С нарастването на r амплитудите на тези състояния изменят един или няколко пъти своя знак. Има $n-1$ сферични възлови повърхнини или места, където ψ преминава през нулата. Например състоянието 2s ($l=0$ и $n=2$) изглежда така, както е показано на фиг. 17.6,*б*. (Тъмните области посочват местата, където амплитудата е голяма, а със знаците плюс и минус са отбелязани относителните фази на амплитудата.) Енергетичните нива на s-състоянията са показани в първия стълб на фиг. 17.7.

След това идват *p*-състоянията с $l=1$. За всяко n (n равно или по-голямо от 2) съществува тройка състояния с еднаква енергия, едно с $m=+1$, друго с $m=0$, трето с $m=-1$. Енергетичните нива са отбелязани на фиг. 17.7. Ъгловите зависимости на тези състояния са приведени в табл. 17.1. Така при $m=0$, ако амплитудата е положителна за ъгли θ, близки до нула, при ъгли θ, близки до 180°, тя ще се окаже отрицателна. Има възлова равнина, съвпадаща с равнината xy. При $n>1$ има също тъй конични възлови повърхнини. Амплитудата за $n=2$, $m=0$ е набелязана на фиг. 17.6,*в*, а вълновата функция за $n=3$, $m=0$ — на фиг. 17.6, *г*.

Вие бихте могли да помислите, че тъй като m дава, така да се каже, „ориентацията“ в пространството, трябва да се наблюдават също такива разпределения с максимуми по оста x или оста y. Може да се помисли, че най-вероятно това са състоянията с $m=+1$ и $m=-1$. Обаче това не е така! Но затова щом ние имаме тройка състояния с еднакви енергии, всяка линейна комбинация на тази тройка също ще бъде стационарно състояние със същата енергия. Оказва се, че „x“-състоянието (по аналогия със „z“-състоянието или със състоянието с $m=0$; вж. фиг. 17.6, *в*) е линейна комбинация на състоянията с $m=+1$ и $m=-1$. Друга линейна комбинация дава „y“-състоянието. Поточно, има се пред вид, че състоянията

$$„z“ = |\,1,0\rangle,$$

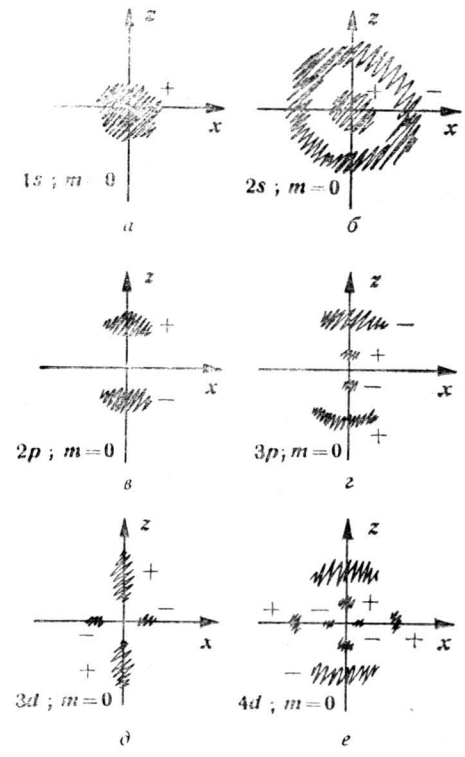
$$„x“ = \frac{|\,1,+1\rangle + |\,1,-1\rangle}{\sqrt{2}},$$

$$„y“ = \frac{|\,1,+1\rangle - |\,1,-1\rangle}{i\sqrt{2}}$$

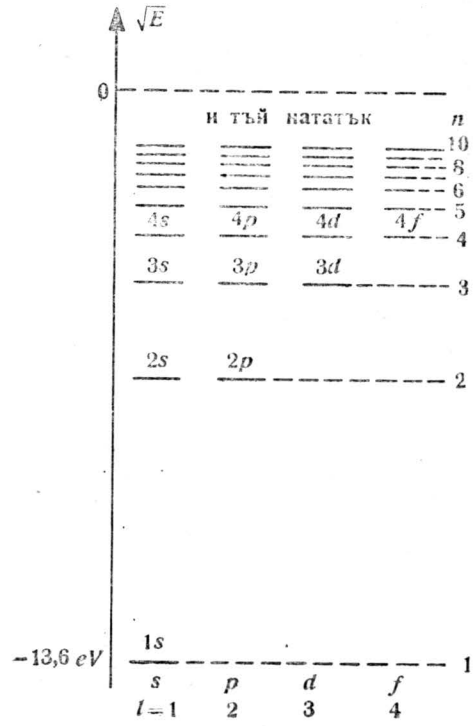
изглеждат еднакво, ако се отнесат към своите оси.

При *d*-състоянията ($l=2$) за всяка енергия числото m има пет възможни стойности; най-ниска енергия се получава при $n=3$. Нивата са показани на фиг. 17.7. Ъгловите зависимости се усложняват. Състоянията с $m=0$ например имат две конични възлови повърхнини, така че при преминаване от северния полюс към южния вълновата функция изменя фазата си от + през — и обратно до +. Примерна форма на амплитудата е нарисувана на фиг. 17.6, *д* и *е* за състоянията с $m=0$ и $n=3$ и 4. И отново при големи n се появяват конични възлови повърхнини.

Ние няма да се опитваме да описваме останалите следващи състо-



Фиг. 17.6. Скици, отразяващи общия характер на вълновите функции на водорода. В защрихованите места амплитудите са големи. Знаците плюс и минус са относителните знаци на амплитудите във всяка област



Фиг. 17.7. Диаграма на енергетичните нива на водорода

яния.Подробно описание на вълновите функции на водорода вие ще намерите в много книги. Особено ви препоръчвам книгите: L. Pauling, E. B. Wilson — Introduction to Quantum Mechanics, New York, 1935; R. B. Leighton — Principles of Modern Physics, New Jork, 1959. В тези книги вие ще намерите графики на някои функции и графично представяне на много състояния.

Бих искал да кажа нещо за едно важно свойство на вълновите функции при големи l: при $l>0$ амплитудите се обръщат в нула в центъра. В това няма нищо удивително, тъй като електронът трудно може да има голям момент, когато рамото на момента е много малко. По тази причина, колкото по-голямо е l, толкова по-далеч от центъра е „изтласкана“ амплитудата. Ако вие погледнете как радиалните функции $F(r)$ се менят при малки r, ще се окаже [от (17.53)], че

$$F_{n,l}\ (r)\approx r^l\ .$$

Такава зависимост от r означава, че при големи l ще ви се наложи да отстъпите по-далече от $r=0$, за да получите забележима амплитуда. Това поведение се определя впрочем от члена на центробежната сила в радиалното уравнение, така че всичко това е приложимо към всеки потенциал, който при малки r се изменя по-бавно от $1/r^2$, а такива са повечето атомни потенциали.

17-6. Периодична таблица

Сега ние бихме искали да приложим теорията на водородния атом за обясняване на периодичната таблица на химичните елементи. В атома на елемента с атомен номер Z има Z електрона, които се удържат от електричното притегляне на ядрото, но при това взаимно се отблъскват един от друг. За да получим точно решение, би се наложило да решим уравнението на Шрьодингер за Z електрона в кулоново поле. За хелия уравнението има вид

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\ (\nabla_1^2\psi+\nabla_2^2\psi)+\ (-\frac{2e^2}{r_1}-\frac{2e^2}{r_2}+\frac{e^2}{r_{12}})\psi,$$

където ∇_1^2 е лапласианът, който действува на $\mathbf{r}$-координатата на първия електрон; ∇_2^2 действува на $\mathbf{r}_2$, а $\mathbf{r}_{12}=(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)$. (Ние отново пренебрегваме спиновете на електроните.) За да намерим стационарни състояния и енергетични нива би трябвало да потърсим решения от вида

$$\psi=f\ (\mathbf{r}_1\ ,\ \mathbf{r}_2)\ e^{-(i\,/\,\hbar)-\mathrm{E}\,t}\ .$$

Геометричната зависимост се съдържа в f — функция на шест променливи — едновременните положения на двата електрона. Никой не знае аналитичното решение, макар че решенията за низшите енергетични състояния са намерени с помощта на числени методи.

Когато електроните са 3,4 или 5, безнадеждно е да се опитваме да получим точни решения. Затова би било неоснователно да се твърди, че квантовата механика обяснява докрай периодичната таблица. Но все пак може да се каже, че даже с помощта на твърде съмнителни приближения (и някои нагаждания впоследствие) се удава поне качествено да се разберат много химически свойства, проявяващи се в периодичната таблица.

Химическите свойства на атомите се определят преди всичко от техните низши енергетични състояния. За намирането на тези състояния и техните енергии ние ще се възползуваме от следната приблизителна теория. Първо, ще пренебрегваме спина на електрона; ще вземаме под внимание само принципа на Паули и ще считаме, че всяко частно електронно състояние може да бъде заето само от един електрон. Това означава, че на една орбита не могат да се окажат повече от *два* електрона — един със спин нагоре, друг със спин надолу. След това ние ще пре-

небрегнем в първо приближение *детайлите* на взаимодействие между електроните и ще считаме, че всеки електрон се движи в *централно поле*, образувано от полетата на ядрото и всички останали електрони. За неона, който има 10 електрона, ние ще казваме например, че всеки електрон в този атом изпитва влиянието на средния потенциал на ядрото и на останалите девет електрона. Ние ще си представяме по-нататък, че в уравнението на Шрьодингер за всеки електрон участвува $V(r)$, което е полето $^1/r$, но съответно видоизменено за сметка на сферично симетричната плътност на заряда, възникнала от останалите електрони.

В такъв модел всеки електрон има поведение на независима частица. Ъгловите зависимости на неговата вълнова функция ще бъдат просто същите, каквито бяха за атома на водорода. Това ще бъдат същите s-състояния, p-състояния и т.п.; в тези състояния числото m ще приема различни възможни стойности. Щом $V(r)$ повече не следва закона $^1/r$, то радиалната част на вълновите функции ще бъде малко различна, но качествено остава предишната, така че и сега, както преди, ще възниква радиалното квантово число n. Енергиите на състоянията също тъй ще бъдат малко различни.

H

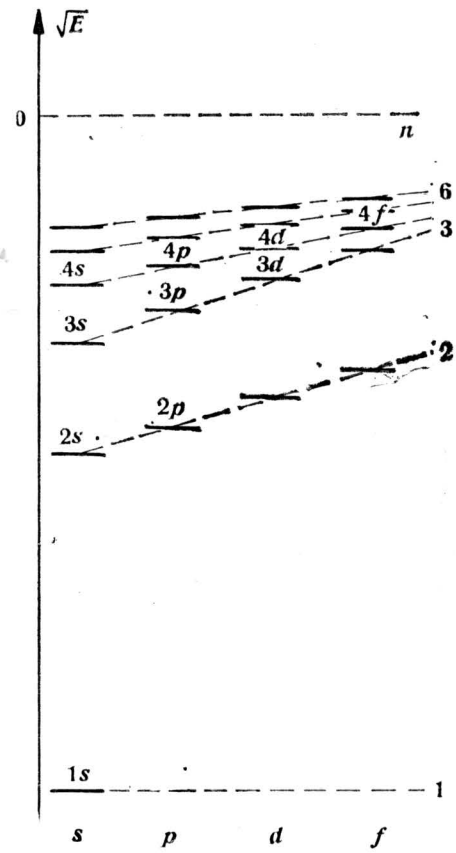
Да видим какво ще се получи за водорода при тези представи. В основното състояние на водорода $l=m=0$ и $n=1$ ние казваме, че електронната конфигурация е $1s$. Енергията е равна на — 13,6 eV. Това означава, че за отделянето на електрона от атома е необходима 13,6 eV енергия. Тя се нарича „йонизационна енергия“ W_I. Голямата йонизационна енергия говори за това, че е трудно да се отдели електронът от атома и въобще показва, че елементът е химически по-малко активен.

He

Сега да се обърнем към хелия. Двата електрона в хелия могат да се намират в едно и също най-ниско енергетично състояние (само че единият има спин, насочен нагоре, а другият — надолу). В своето най-ниско състояние електронът се движи в поле с потенциал, който при малки r прилича на кулонов потенциал със $Z=2$, а при големи r — в поле на кулонов потенциал със $Z=1$. Вследствие на това възниква „водородоподобното“ $1s$-състояние с малко по-ниска енергия. Двата електрона заемат едни и същи $1s$-състояния ($l=0$, $m=0$). Наблюдаваната йонизационна енергия (необходима за отделяне на един електрон) е равна на 24,6 eV. Тъй като сега „слоят“ $1s$ е запълнен (повече от два електрона в него не може да се поместят), практически не възникват тенденции за привличане на електрони от други атоми. Хелият е химически инертен.

Li

Ядрото на лития има заряд 3. Състоянията на електрона са отново водородоподобни и трите електрона заемат трите най-ниски енергетични нива. Два попадат в състояние $1s$, а третият минава в състоянието с $n=2$. Но с $l=0$ или с $l=1$? За водорода тези състояния имат една и съща енергия, но за другите атоми това не е така и ето по каква причина. Да си спомним, че $2s$-състоянието има някаква амплитуда за това, че то ще се окаже близко до ядрото, а $2p$ няма такава амплитуда. Това означава, че $2s$-електронът ще изпитва по някакъв начин действието на тройния електричен заряд на ядрото на Li, а $2p$-електронът остава там, където полето изглежда като кулоново поле на единичен заряд. Добавъчното привличане понижава енергията на $2s$-състоянието в сравнение с енергията на $2p$-състоянието. Енергетичните нива ще се окажат примерно такива, както е показано на фиг. 17.8 (сравнете със съответната диаграма за водорода на



Фиг. 17.8. Схематична диаграма на енергетичните нива на атомния електрон в присъствие на други електрони. (Мащабът е различен от този на фиг. 17.7.)

фиг. 17.7). Следователно в атома на лития двата електрона ще бъдат в 1*s*-състояние, а третият — в 2*s*-състояние. Тъй като електронът в 2*s*-състояние има по-висока енергия, отколкото електронът в 1*s*-състояние, той може сравнително лесно да се отдели. Йонизационната енергия на лития е само 5,4 e V и той е твърде активен химически.

Така пред вас постепенно се открива цялата картина; в табл. 17.2 ние даваме списък на първите 36 елемента, като отбелязваме състоянията, заемани от електроните в основното състояние на всеки атом. В таблицата се дава йонизационната енергия за най-слабо свързания електрон и броят на електроните, заемащи всеки „слой", т. е. състоянията с едно и също квантово число n

Таблица 17.2

Електронни конфигурации на първите 36 елемента
(брой на електроните в различните състояния)

Z	Елемент	W_I, eV	Електронна конфигурация									
			1 *s*	2*s*	2*p*	3*s*	3*p*	3*d*	4 *s*	4 *p*	4*d*	4 *f*
1	H водород	13,6	1									
2	He хелий	24,6	2									
3	Li литий	5,4		1								
4	Be берилий	9,3		2								
5	B бор	8,3		2	1							
6	C въглерод	11,3	запълнени	2	2							
7	N азот	14,5	(2)	2	3							
8	O кислород	13,6		2	4							
9	F флуор	17,4		2	5							
10	Ne неон	21,6		2	6							
11	Na натрий	5,1				1						
12	Mg магнезий	7,6				2						
13	Al алуминий	6,0				2	1					
14	Si силиций	8,1	— запълнени —			2	2					
15	P фосфор	10,5	(2)	(8)		2	3					
16	S сяра	10,4				2	4					
17	Cl хлор	13,0				2	5					
18	Ar аргон	15,8				2	6					
19	K калий	4,3							1			
20	Ca калций	6,1							2			
21	Sc скандий	6,5						1	2			
22	Ti титан	6,8						2	2			
23	V ванадий	6,7	— запълнени —					3	2			
24	Cr хром	6,8	(2)	(8)		(8)		5	1			
25	Mn манган	7,4						5	2			
26	Fe желязо	7,9						6	2			
27	Co кобалт	7,9						7	2			
28	Ni никел	7,6						8	2			
29	Cu мед	7,7						10	1			
30	Zn цинк	9,4						10	2			
31	Ga галий	6,0							2	1		
32	Ge германий	7,9							2	2		
33	As арсен	9,8	— запълнени —						2	3		
34	Se селен	9,7	(2)	(8)		(18)			2	4		
35	Br бром	11,8							2	5		
36	Kr криптон	14,0							2	6		

Тъй като различните l-състояния имат различни енергии, на всяка стойност на l отговаря някакъв подслой от $2(2l+1)$ възможни състояния (с различни m и различни посоки на спина). Всички те имат еднаква енергия с точност до някои слаби ефекти, които ние пренебрегваме.

Be

Берилият прилича на лития, само че при него в $2s$-състоянието се намират два електрона и в запълнения $1s$-слой също два.

От B до Ne

Борът има 5 електрона. Петият трябва да заеме $2p$-състояние. Има всичко $2\text{x}3=6$ различни $2p$-състояния, затова можем да продължим да добавяме в този слой по един електрон, докато те станат 8. Така стигаме до неона. Добавяйки тези електрони, ние увеличаваме също и Z, затова цялото електронно разпределение се уплътнява все повече и повече към ядрото и енергията на $2p$-състоянията се понижава все повече и повече. И когато стигнем до неона, йонизационната енергия нараства до 21,6 eV. Неонът не дава лесно своя електрон. В него при това няма свободни места по орбитата, които да могат да се запълнят, така че и чужди електрони не са му нужни. Следователно неонът е химически инертен. Флуорът има свободно място; ако в него попадне електрон, той може да се окаже в състояние с ниска енергия, затова флуорът е много активен в химическите реакции.

От Na до Ar

Единадесетият електрон в натрия е принуден да започне нов слой, преминавайки в $3s$-състояние. Енергията на това състояние е много висока; йонизационната енергия рязко спада: натрият е химически много активен. От натрия до аргона s- и p-състоянията се запълват в същия ред, както от лития до неона. Ъгловите конфигурации на електроните във външния незапълнен слой вървят в същата последователност и прогресиращото нарастване на йонизационната енергия също прилича много на това, което беше по-рано. Вие сега разбирате защо химическите свойства се повтарят с нарастване на атомното число. Химическото действие на магнезия много прилича на това на берилия, на силиция съответствува въглеродът, а на хлора — флуорът. Аргонът, подобно на неона, е инертен.

Вие може би вече сте забелязали, че в последователността на йонизационната енергия от лития до неона има малка особеност и същата особеност се наблюдава между натрия и аргона. Последният електрон е прикрепен към атома на кислорода малко по-слабо, отколкото би могло да се очаква. Със същото се отличава и сярата. Защо е така? Ние можем да разберем това, ако по-внимателно се замислим над ефектите на взаимодействие между електроните. Да помислим за това какво става, когато поместваме в атома на бора първия $2p$-електрон. Той има шест възможности — три възможни p-състояния, във всяко по два спина. Да си представим, че електронът със спин нагоре попада в състояние с $m=0$, което ние ще наричаме също „z"-състояние, защото то обвива оста z. А какво ще стане във въглерода? Сега $2p$-електроните вече са два. Ако единият от тях попада в „z"-състояние, къде ще попадне вторият? Неговата енергия ще бъде най-ниска тогава, когато се разположи възможно най-далеч от първия електрон. Това може да се постигне, ако той попадне да речем в „x" — състоянието на слоя. (Това състояние, както вие разбирате, е просто линейна комбинация на състоянията с $m=+1$ и $m=-1$.) По-нататък, когато преминем към азота, за тройката $2p$-електрони се получава най-малка енергия на взаимно отблъскване тогава, когато единият от тях попада в „x" - конфигурация, другият — в „y", а третият — в „z". Целият този хоровод обаче не се получава при кислорода. На четвъртия електрон вече нищо не му остава, освен да заеме едно от заетите състояния, ориентирайки при това своя спин надолу. Електронът, който вече се намира в това състояние, ще започне силно да го отблъсква, така че неговата енергия няма да бъде така ниска, каквато тя би била в противния случай, и затова той може по-лесно да бъде отделен. С това се и обяснява скокът

в редицата на свързочните енергии, който се появява между азота и кислорода и между фосфора и сярата.

От K до Zn

Би могло да се помисли, че след аргона новите електрони ще започнат да запълват състоянията $3d$. Но не! Както вече говорихме (и илюстрирахме на фиг. 17.7), състоянията с висши моменти са отместени нагоре по енергията. В момента, когато ние идваме до $3d$ — състоянията, те се оказват отместени по енергията малко по-високо от енергията на $4s$ — състоянието. След това в калция слоят се запълва (с два електрона), а $3d$-състоянията ще започнат да се запълват при скандия, титана и ванадия.

Енергиите на $3p$-и $4s$-състоянията са така близки едно до друго, че слабо забележими ефекти отместват равновесието на една или друга страна. До момента, когато в $3d$-състоянията трябва да се поместят четири електрона, тяхното отблъскване така ще повиши енергията на $4s$-състоянието, че тя ще стане малко по-висока от енергията на $3d$-състоянието, затова един електрон от s — минава в d — състояние. И за хрома не се получава очакваната комбинация 4,2, а вместо това се осъществява комбинацията 5,1. Новият електрон, който се добавя, за да се получи манган, отново запълва слоя $4s$ и тогава следва запълването на $3d$ слоя подред, докато стигнем до медта.

Но тъй като най-външният слой на мангана, желязото, кобалта и никела има една и съща конфигурация, всички те имат близки химични свойства. (Този ефект е изразен още по-силно при редките земи. За тях външният слой е еднакъв, а постепенно се запълва вътрешният слой, което по-слабо влияе на химичните свойства.

Същото е и при медта. За нея построяването на $3d$-слоя завършва с грабеж: отвлича се един електрон от $4s$-слоя. Енергията на комбинацията 10,1 за медта обаче е толкова близка до енергията на комбинацията 9,2, че равновесието може да се отмести даже ако близо стои друг атом. По тази причина двата последни електрона на медта са примерно равностойни и нейната валентност е равна ту на 1, ту на 2. (От време на време тя се проявява така, както ако електроните биха били в комбинация 9,2.) Подобни неща се случват и на други места в таблицата; поради това именно другите метали, като желязото, участвуват в химическите съединения с различни валентности. На края в цинка двата слоя $3d$ и $4s$ се запълват веднъж завинаги.

От Ga до Kr

От галия до криптона последователността отново се запазва нормална, като се запълва $4p$-слоя. Външните слоеве, енергиите и химическите свойства повтарят картината на промените в участъците от бора до неона и от алуминия до аргона.

Криптонът, както аргонът или неонът, е известен като „благороден“ газ. И трите „благородни“ газа са химически „инертни“[1]. Това означава само, че след като те са запълнили слоевете със сравнително ниски енергии, ще бъдат редки случаите, когато за тях ще стане енергетически изгодно да се свързват в прости съчетания с други елементи. Но за „благородство“ не е достатъчно просто притежанието на запълнен слой. В берилия например или в магнезия са запълнени s-слоевете, но енергията на тези слоеве е твърде висока, за да може да се говори за устойчивост. Съвсем аналогично би могло да се очаква появяването на друг „благороден“ елемент някъде около никела, ако енергията на $3d$-слоя би

[1] В действителност мнението за инертността на благородните газове се оказва, както и много други неща, силно преувеличение. Криптонът например твърде охотно се свързва с флуора, образувайки кристали на Kr F_6. Сега химията на инертните газове се превръща в голяма и увлекателна наука (бел. ред. на руското издание).

била малко по-ниска (или на 4*s*-слоя малко по-висока). От друга страна, криптонът не е напълно инертен; той образува с хлора неустойчиво съединение.

Тъй като в разгледаната от нас част на таблицата се проявяват всички основни свойства на периодичната система, ние прекъсваме нашето изложение с елемента №36 (остават още 70 или даже повече!).

Искаме да отбележим още един момент: ние сме в състояние да разберем до известна степен не само валентността, но можем нещо да кажем и за посоките на химичните връзки. Да вземем кислородния атом. В него има четири 2*p*-електрона. Първите три попадат в състоянията „*x*“, „*y*“ и „*z*“, а четвъртият е принуден да запълни едно от тях, оставяйки двете свободни да кажем „*x*“ и „*y*“. Погледнете сега какво става в молекулата H_2O. Всеки от двата водорода се стреми да подели своя електрон с кислорода, помагайки му да запълни своя слой. Тези електрони ще се стремят да попаднат в свободните „*x*“ и „*y*“ състояния. Затова двата водорода в молекулата на водата се разполагат под прав ъгъл един спрямо друг, ако се гледа от центъра на кислородния атом. В действителност ъгълът е равен на 105°. Може даже да се разбере защо ъгълът е по-голям от 90°. Обобществявайки своите електрони с кислорода, водородните атоми остават в края на краищата с излишък от положителен заряд. Електричното отблъскване „разтегля“ вълновите функции и разширява ъгъла до 105°. Точно така е и при H_2S. Но атомите на сярата са по-големи, водородните атоми се оказват по-далеч един от друг, и ъгълът се разширява само до 93°. А селенът е още по-голям, затова в H_2Se ъгълът вече е съвсем близък до 90°.

Аналогични разсъждения дават възможност да се разбере геометрията на амоняка H_3N. В азота има място още за три 2*p*-електрона, по един за всяко състояние от типа „*x*“, „*y*“ и „*z*“. Трите водорода са принудени да се присъединят под прави ъгли един спрямо друг. Ъглите пак ще се окажат малко по-големи от 90°, отново поради електричното отблъскване, но сега е ясно поне защо молекулата на H_3N не е плоска. Ъглите във фосфина H_3P са вече по-близки до 90°, а в H_3As още по-близки. Ние не напразно предположихме, че молекулата NH_3 не е плоска, когато говорихме за нея, като система с две състояния. Именно поради тази обемност на амоняка е и възможен амонячният мазер. Вие виждате, че самата форма на амонячната молекула също следва от квантовата механика.

Уравнението на Шрьодингер е велик триумф на физиката. Като ни дава ключ за разбиране на механизма, лежащ в основата на атомния строеж, то обяснява атомните спектри и цялата химия, благодарение на което става ясна и физическата природа на материята.

18

Операции

18-1. Операции и оператори

18-2. Средни енергии

18-3. Средна енергия на атома

18-4. Оператор на мястото

18-5. Оператор на импулса

18-6. Момент на количеството на движение

18-7. Изменение на средните с времето

18-1. Операции и оператори

Всичко, което ние правихме досега в квантовата механика, можеше да се разбере с помощта на обикновената алгебра, но ние все пак демонстрирахме от време на време особени начини за написване на квантовомеханичните величини и уравнения. Сега бихме искали да разкажем малко повече за някои интересни и полезни начини за описание на квантовомеханичните величини.

До предмета на квантовата механика може да се стигне по много пътища и в много книги прибягват до съвсем различен от нашия подход. Когато вие започнете да четете други книги, може да се окаже, че няма да можете да свържете веднага това, за което се говори в тях, с това, което правихме ние. Макар че в тази глава ние ще получим някои нови резултати, тя не прилича на другите глави. Тя има съвсем друга цел : да разкаже за другите начини на изразяване на същите физически представи. Като знаете това, вие по-лесно ще разберете за какво става дума в другите книги.

Когато хората започнали за пръв път да разработват класическата механика, те неизменно записвали своите уравнения чрез x-, y- и z-компонентите. След това някой направил крачка напред и посочил, че всичко може да се опрости, като се въведат векторни означения. Наистина, много често, за да си представите задачата по-конкретно, вие разбивате векторите обратно на компоненти. Но въпреки това, все пак е много по-лесно да се правят пресмятания и да се вникне в същността на работата, като се работи с вектори. В квантовата механика на нас също ни се удаде да опростим записването на много неща, използувайки идеята за „вектор на състоянието“. Векторът на състоянието $|\psi>$, разбира се, няма нищо общо с геометричните вектори в тримерното пространство; това просто е един отвлечен символ на *физическото състояние*, което има „белег“, или „название“ ψ. Тази представа е много, много полезна, тъй като на езика на тези символи законите на квантовата механика изглеждат като алгебрични уравнения. Например, този наш фундаментален закон, че всяко състояние може да се представи като линейна комбинация на базисните състояния, се записва така

$$|\psi>=\sum_i C_i\,|i>, \tag{18.1}$$

където величините C_i представляват съвкупност от обикновени (комплексни) числа — амплитуди $C_i=<i\mid\psi>$, а $\mid 1>$, $\mid 2>$, $\mid 3>$ и т.н. са базисни състояния в някакъв базис или в някакво *представяне*.

Ако вземете някакво физическо състояние и нещо правите с него (завъртате координатната система или чакате в течение на време Δt или нещо друго), вие получавате вече друго състояние. Ние казваме: „извършвайки над състоянието някаква операция, получаваме ново състояние“. Същата тази идея може да се изрази чрез уравнението

$$|\varphi>=\hat{A}\;|\psi>. \tag{18.2}$$

Една операция над дадено състояние създава ново състояние. *Операторът* $\hat{A}$ означава някаква определена операция. Когато тази операция се извършва над някакво състояние, да речем над

$|\psi>$, тя създава някакво друго състояние $|\varphi>$.

Какво означава уравнението (18.2)? Ние *определяме* неговия смисъл така. Умножавайки двете му страни с $<i|$ и разлагайки $|\psi>$ съгласно (18.1), получаваме

$$<i|\varphi>=\sum_j <i|\hat{A}|j><j|\psi> \tag{18.3}$$

($|j>$ са състояния от същата съвкупност, от която са и $|i>$.) Сега това е просто алгебрично уравнение. Числото $<i|\varphi>$ показва какво количество базисно състояние $|i>$ ще намерите в $|\varphi>$ и то се определя чрез линейна суперпозиция на амплитудите $<j|\psi>$ за това, че вие ще намерите $|\psi>$ в едно или друго базисно състояние. Числата $<i|\hat{A}|j>$ са просто коефициенти, които показват колко (каква част) от амплитудата $<j|\psi>$ влиза в сумата. Операторът $\hat{A}$ се задава с числовия набор или с „матрицата“

$$A_{ij} \equiv <i|\hat{A}|j>. \tag{18.4}$$

Значи (18.2) е уравнението (18.3), написано на високо ниво. А всъщност даже нещо повече: то съдържа и нещо друго. Уравнението (18.2) не съдържа конкретна зависимост от някаква координатна система. А уравнението (18.3) е образ на (18.2) в някаква система от базисни състояния. Но, както е известно, всяка система е година за работа. Именно това се има пред вид в (18.3). Следователно при операторния начин за записване се избягва конкретният избор на координатната система. Разбира се, ако искате определеност, вие сте свободни да изберете една конкретна система. И когато направите този избор, вие пишете (18.3). Значи *операторното* уравнение (18.2) е по-отвлечен начин за записване на *алгебричното* уравнение (18.3). Това много прилича на разликата между равенството

$$\mathbf{c}=\mathbf{a}\times\mathbf{b}$$

и равенствата

$$\begin{aligned} c_x &= a_y\ b_z - a_z\ b_y, \\ c_y &= a_z\ b_x - a_x\ b_z, \\ c_z &= a_x\ b_y - a_z\ b_x. \end{aligned}$$

Първият начин е по-нагледен. Но ако ви потрябват *числа*, вие навярно ще зададете най-напред компонентите спрямо някаква координатна система. Точно така, ако вие искате да дадете да се разбере какво е това $\hat{A}$, вие трябва да бъдете готови да зададете матрицата A_{ij} чрез *някаква* съвкупност от базисни състояния. И докато имате определена съвкупност от числа A_{ij}, уравнението (18.2) означава това, което означава и (18.3). (И трябва да се помни, че ако знаете матрицата за една частна съвкупност от базисни състояния, винаги е възможно пресмятането на матрицата, съответстваща на кой да е друг базис. Матрицата винаги може да се трансформира от едно представяне в друго.)

Операторното уравнение (18.2) допуска и други възможности. Ако ние сме си представили някакъв оператор $\hat{A}$, можем да го приложим към всяко състояние $|\psi>$ и той ще създаде ново състояние $\hat{A}|\psi>$. Понякога полученото по този начин „състояние“ може да се окаже твърде своеобразно — то може вече да не представлява никаква *физическа* ситуация, която се среща в природата. (Например, може да се получи състояние, което не е нормирано повече така, че да се получава един електрон.) С други думи понякога ние можем да получим „състояния“, които са математически изкуствени образования. Тези изкуствени „състоя-

ния" все едно могат да се окажат полезни, най-често в някакви междинни пресмятания.

Ние вече дадохме много примери на квантовомеханични оператори. Срещахме оператора $R_y(\theta)$, който, като действува на състоянието $|\psi>$, го превръща в ново състояние, представляващо старото състояние от гледна точка на завъртяната координатна система. Срещахме оператора на четността (или на инверсията) $\hat{P}$, който създава ново състояние, обръщайки координатите. Срещахме и операторите $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ и $\hat{\sigma}_z$ за частица със спин 1/2.

Операторът $\hat{J}_z$ беше определен в гл. 15 чрез оператора на въртене на малки ъгли ε:

$$\hat{R}_z(\varepsilon) = 1 + \frac{i}{\hbar}\varepsilon \hat{J}_z \ . \tag{18.5}$$

Това, разбира се, означава, че

$$\hat{R}_z(\varepsilon) \mid \psi> = \mid \psi> + \frac{i}{\hbar}\varepsilon \hat{J}_z \mid \psi> . \tag{18.6}$$

В този пример $\hat{J}_z \mid \psi>$ е умножено на $\hbar/i\varepsilon$ състояние, което се получава, ако вие завъртите $\mid \psi>$ на малък ъгъл ε и след това извадите предишното състояние. То представлява едно „състояние", което се явява като *разлика* на две състояния.

Още един пример. Ние имахме оператора $\hat{p}_x$; той се нарича оператор на x-компонентата на импулса и се определяше от уравнение, подобно на (18.6). Ако $\hat{D}_x(L)$ е операторът, който отмества състоянието по оста x на разстояние L, то $\hat{p}_x$ се определяше така

$$\hat{D}_x(\delta) = 1 - \frac{i}{\hbar}\delta \hat{p}_x , \tag{18.7}$$

където δ е малко отместване. Отместването на състоянието $|\psi>$ по оста x на малко разстояние δ дава ново състояние $|\psi'>$. Ние казваме, че новото състояние е равно на старото плюс малката добавка

$$\frac{i}{\hbar}\delta \hat{p}_x \mid \psi> .$$

Операторите, за които говорим сега, действуват на вектора на състоянието, да речем на $\mid \psi>$, представляващ абстрактно описание на дадена физическа ситуация. Това съвсем не са онези *алгебрични* оператори, действуващи на математически функции. Например d/dx е „оператор", който, като действува на $f(x)$, създава от нея нова функция $f'(x) = df/dx$. Друг пример за алгебричен оператор е ∇^2. Лесно е да се разбере защо и в двата случая се използува едно и също название, но трябва да се помни, че това са различни типове оператори. Квантовомеханичният оператор $\hat{A}$ действува *не* на алгебрична функция, а на вектор на състоянието, да речем $\mid \psi>$. В квантовата механика се употребяват и едните, и другите оператори, и както ще видите, често пъти в уравнения от сходен тип.

Когато вие изучавате за първи път предмета, през цялото време трябва да имате пред вид тази разлика. А по-късно, когато предметът ви стане по-близък, ще видите, че не е така важно да се прави рязко разграничаване между едните оператори и другите. И в много книги, както вие ще се убедите, двата типа оператори се означават еднакво.

Сега е време да минем по-нататък и да научим много полезни неща, които могат да се правят с операторите. Но най-напред една забележка. Нека ние имаме оператор $\hat{A}$, матрицата на който в някакъв базис е $A_{ij} \equiv <i \mid \hat{A} \mid j>$. Амплитудата за това, че състоянието $\hat{A} \mid \psi>$ се намира също в някое друго състояние

$|\varphi>$, е $<\varphi|A|\psi>$. Има ли смисъл действието комплексно спрягане за тази амплитуда? Вие вероятно ще съумеете да покажете, че

$$<\varphi|\hat{A}|\psi>^*=<\psi|A^+|\varphi>, \tag{18.8}$$

където $\hat{A}^+$ (чете се „A с кръст“) е оператор, чиито матрични елементи са равни на

$$A^+_{ij}=(A_{ji})^*. \tag{18.9}$$

С други думи, за да получите i,j-я елемент на матрицата A^+, вие се обръщате към j,i-я елемент на матрицата $\hat{A}$ (индексите са транспонирани) и го спрягате комплексно. Амплитудата за това, че състоянието $\hat{A}^+|\varphi>$ се намира в състояние $|\varphi>$, е комплексно спрегната на амплитудата за това, че $\hat{A}|\psi>$ се намира в $|\varphi>$. Операторът $\hat{A}^+$ се нарича „ермитово спрегнат“ на оператора $\hat{A}$. Голям брой важни оператори в квантовата механика имат специално свойство: ако ги спрегнете ермитово, вие отново получавате същия оператор. Ако $\hat{B}$ е точно такъв оператор, то $\hat{B}^+=\hat{B}$; той се нарича „самоспрегнат“ или ермитов оператор.

18-2. Средни енергии

Досега в основни линии ние ви напомняхме за това, което вече знаете. А сега да преминем към нещо ново. Как вие бихте пресметнали *средната* енергия на една система, например на един атом? Ако атомът се намира в определено състояние с определена енергия и вие измервате тази енергия, ще получите определена енергия E. Ако започнете да повтаряте измерванията с всеки от множеството атоми, които са подбрани така, че всички да бъдат в едно и също състояние, всяко измерване ще ви дава E, така че „средната“ енергия от всички ваши измервания, разбира се, също ще се окаже равна на E.

Но какво ще се случи, ако вие направите вашите измервания за състояние $|\psi>$, което *не е* стационарно? Щом системата няма определена енергия, едно измерване ще даде една енергия, същото измерване с друг атом в същото състояние ще даде друга енергия и т. н. Каква ще се окаже средната енергия от цялата серия измервания?

Ние ще можем да отговорим на този въпрос, ако вземем проекцията на състоянието $|\psi>$ върху системата от състояния с определена енергия. За да помним, че това е особен базис, ще означаваме състоянията с $|\eta_i>$. Всяко от състоянията $|\eta_i>$ има определена енергия E_i. В това представяне

$$|\psi>=\sum_i C_i|\eta_i>. \tag{18.10}$$

Когато правите измерване на енергията и получавате някакво число E_i, вие по такъв начин откривате, че системата е била в състояние $|\eta_i>$. Но при всяко ново измерване може да получите ново число. Понякога вие получавате E_1, понякога E_2, понякога E_3 и т. н. *Вероятността*, че ще измерите енергия E_1, е равна просто на вероятността за намиране на системата в състояние $|\eta_1>$, т. е. на квадрата на модула на амплитудата $C_1=<\eta_1|\psi>$. Вероятността да се намери една или друга възможна стойност на енергията E_i е

$$P_i=|C_i|^2. \tag{18.11}$$

Как да се свържат тези вероятности със средната стойност от цялата поредица измервания на енергията? Да си представим, че ние сме получили редица резултати от измерванията, например E_1, E_7, E_{11}, E_9, E_{10}, E_7, E_2, E_3, E_9, E_6, E_4 и т. н., всичко хиляда измервания. Събираме всички енергии и резултата делим на 1000. Това е средната енергия. Събирането може да се извър-

ши по-бързо. Пребройте колко пъти сте получили E_1 (да речем N_1 пъти), колко пъти сте получили E_2 (да речем N_2 пъти) и т. н. Ясно е, че сумата на всички енергии е равна на

$$N_1E_1 + N_2E_2 + N_3E_3 + \ldots = \sum_i N_i E_i \ .$$

Средната енергия е равна на тази сума, делена на пълния брой на измерванията, т. е. на сумата на всички N_i, която ние ще означим с N:

$$E_{\text{ср}} = \frac{\sum_i N_i E_i}{N} \ . \tag{18.12}$$

Ние сме почти до целта. Под вероятност на някакво събитие *разбираме* точно броя на случаите, когато се очаква настъпването на това събитие, разделен на общия брой на измерванията. Отношението N_i/N ще се различава при големи N незначително от P_i — вероятността за намиране на състоянието $|\eta_i>$, като не може да съвпадне точно с P_i поради статическите флуктуации. Да означим предсказваната (или „очакваната“) средна енергия с $<E>_{\text{ср}}$; тогава имаме право да пишем

$$<E>_{\text{ср}} = \sum_i P_i E_i \ . \tag{18.13}$$

Същите разсъждения са валидни при измерване на каквито и да е величини. Средната стойност на измерваната величина трябва да е равна на

$$<\text{A}>_{\text{ср}} = \sum_i P_i E_i \ ,$$

където A_i са различни допустими стойности на наблюдаваната величина, а P_i е вероятността за получаване на тази стойност.

Сега да се върнем към нашето квантовомеханично състояние $|\psi>$. Неговата средна енергия е равна

$$<E>_{\text{ср}} = \sum_i |\ C_i|^2 E_i = \sum_i C_i^* C_i E_i \ . \tag{18.14}$$

По-нататък следете внимателно! Най-напред ще препишем тази сума така

$$\sum_i <\psi \mid \eta_i > E_i <\eta_i \mid \psi>. \tag{18.15}$$

Сега можем да разглеждаме лявото $<\psi|$ като общ множител. Изнасяме го пред знака на сумата и пишем

$$<\psi \mid \{ \sum_i |\ \eta_i > E_i <\eta_i \mid \psi>\}.$$

Този израз има вид $<\psi \mid \varphi>$, където $|\varphi>$ е някакво „измислено“ състояние, определено с равенството

$$|\ \varphi> = \sum_i |\ \eta_i > E_i <\eta_i \mid \psi>. \tag{18.16}$$

С други думи, това е състоянието, което ще получите, ако вземете всяко базисно състояние $|\eta_i>$ в количество $E_i <\eta_i \mid \psi>$.

Но да си спомним сега какво е $|\eta_i>$. Състоянията се считат стационарни, т. е. за всяко от тях

$$\widehat{H} \mid \eta_i> = E_i \mid \eta_i>.$$

Но щом E_i е просто число, дясната част на това равенство съвпада с $|\eta_i> E_i$, а (18. 16) — с

$$\sum_i \hat{H} \mid \eta_i > < \eta_i \mid \psi > .$$

Сега остава да се проведе сумирането по i на общоизвестната комбинация, водеща до единица

$$\sum_i \hat{H} \mid \eta_i > < \eta_i \mid \psi > = \hat{H} \sum_i \mid \eta_i > < \eta_i \mid \psi > = \hat{H} \mid \psi > .$$

Чудесно, уравнението (18.16) съвпада с

$$\mid \varphi > = \hat{H} \mid \psi > . \tag{18.17}$$

Средната енергия на състоянието $\mid \psi >$ следователно приема следния твърде привлекателен вид

$$< E >_{\text{ср}} = < \psi \mid \hat{H} \mid \varphi > . \tag{18.18}$$

За да получите средната енергия, подействувайте на $\mid \psi >$ с оператора $\hat{H}$ и след това умножете с $< \psi \mid$. Много прост резултат.

Нашата нова формула за средната енергия е не само привлекателна, но е и полезна. Сега вече не трябва да се говори нищо за особената система от базисни състояния. И даже не е нужно да се знаят всички енергетични нива. Достатъчно е нашето състояние да се изрази при пресмятанията чрез *каква да е* съвкупност от базисни състояния и ако знаем хамилтоновата матрица H_{ij} за *тази* съвкупност, ние вече можем да узнаем средната енергия. Уравнението (18.18) показва, че при *всяка* съвкупност от базисни състояния $\mid i >$ средната енергия може да бъде пресметната по формулата

$$< E >_{\text{ср}} = \sum_{ij} < \psi \mid i > < i \mid \hat{H} \mid j > < j \mid \psi >, \tag{18.19}$$

където амплитудите $< i \mid \hat{H} \mid j >$ са точно елементите на матрицата H_{ij}.

Да проверим това за частния пример, когато състоянията $\mid i >$ са състояния с определена енергия. За тях $\hat{H} \mid j > = E_j \mid j >$, така че $< i \mid H \mid j > = E_j \, \delta_{ij}$ и

$$< E >_{\text{ср}} = \sum_{ij} < \psi \mid i > E_i \, \delta_{ij} < j \mid \psi > = \sum_i E_i < \psi \mid i > < i \mid \psi >,$$

което е напълно естествено.

Уравнението (18.19) може впрочем да се обобщи и за други физически измервания, които могат да се изразят във вид на оператор. Нека например $\hat{L}_z$ да е операторът на z-компонентата на момента на количеството на движение **L**. Средната стойност на z компонента за състоянието $\mid \psi >$ е равна на

$$< L_z > = {}_{\text{ср}} = < \psi \mid \hat{L}_z \mid \psi > .$$

Един от начините за доказване на тази формула е да се измисли такава задача, в която енергията е пропорционална на момента на количеството на движение. Тогава всички разсъждения просто се повтарят.

Обобщавайки, можем да кажем, че ако една физически наблюдаема величина A е свързана със съответен квантовомеханичен оператор $\hat{A}$, средната стойност на A в състоянието $\mid \psi >$ се дава с формулата

$$< A >_{\text{ср}} = < \psi \mid \hat{A} \mid \psi > . \tag{18.20}$$

Това означава, че

$$< A >_{\text{ср}} = < \psi \mid \varphi >, \tag{18.21}$$

където

$$\mid \varphi > = \hat{A} \mid \psi > . \tag{18.22}$$

18-3. Средна енергия на атома

Да предположим, че искаме да узнаем средната енергия на атома в състоянието, което се описва от функцията $\psi(\mathbf{r})$; как да я намерим? Да разгледаме най-напред едномерна задача, когато състоянието $|\psi\rangle$ се определя от амплитудата $\langle x|\psi\rangle$. Интересува ни частния случай на приложение на уравнението (18.19) в координатно представяне. Следвайки обикновената процедура, да заменим състоянията $|i\rangle$ и $|j\rangle$ с $|x\rangle$ и $|x'\rangle$, а сумата — с интеграл. Получаваме

$$\langle E\rangle_{\text{ср}}=\int\int \langle\psi|x\rangle\langle x|\hat{H}|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle\,dx\,dx'. \qquad (18.23)$$

При желание този интеграл може да се запише още така

$$\int \langle\psi|x\rangle\langle x|\varphi\rangle\,dx, \qquad (18.24)$$

където

$$\langle x|\varphi\rangle=\int \langle x|\hat{H}|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle\,dx'. \qquad (18.25)$$

Интегралът по x' в (18.25) е същият като интеграла, който срещахме в гл. 14 [вж. (14.50) и (14.52)]. Той е равен на

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+V(x)\,\psi(x).$$

Затова можем да напишем

$$\langle x|\varphi\rangle=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right\}\psi(x). \qquad (18.26)$$

Да си спомним, че $\langle\psi|x\rangle=\langle x|\psi\rangle^*=\psi^*(x)$; с помощта на това равенство средната стойност на енергията в (18.23) може да се напише във вида

$$\langle E\rangle_{\text{ср}}=\int \psi^*(x)\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right\}\psi(x)\,dx. \qquad (18.27)$$

Ако вълновата функция $\psi(x)$ е известна, пресмятайки този интеграл, вие ще получите средната енергия. Сега започвате да разбирате как от представите за вълнов вектор може да се премине към представата за вълнова функция и обратно.

Величината във фигурните скоби в (18.27) е *алгебричен* оператор. [„Операторът“ $V(x)$ означава „умножаване с $V(x)$“.] Ние ще го означим с $\hat{\mathscr{H}}$.

$$\hat{\mathscr{H}}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V.$$

В тези означения (18.23) приема вида

$$\langle E\rangle_{\text{ср}}=\int \psi^*(x)\,\hat{\mathscr{H}}\,\psi(x)\,dx. \qquad (18.28)$$

Определеният тук алгебричен оператор $\hat{\mathscr{H}}$, разбира се, не е тъждествен с квантовомеханичния оператор $\hat{H}$. Новият оператор действува на координатната функция $\psi(x)=\langle x|\psi\rangle$, образувайки нова функция на x, $\varphi(x)=\langle x|\varphi\rangle$, а $\hat{H}$ действува на вектора на състоянието $|\psi\rangle$, при което не се има пред вид нито координатно, нито въобще каквото и да е частно представяне. Нещо повече, даже в координатното представяне $\hat{\mathscr{H}}$ не е съвсем това, което е $\hat{H}$. Ако ние бихме решили да работим в координатно представяне, би се наложило да придаваме смисъл на оператора $\hat{H}$ с помощта на матрицата $\langle x|\hat{H}|x'\rangle$, която зависи някак си от двата „индекса“ x и x'; с други думи, би трябвало да се очаква, че [както се вижда от (18.25)] $\langle x|\varphi\rangle$ е

свързано с всичк иамплитуди $<x \mid \psi>$ чрез операцията интегриране. А, от друга страна ние намерихме, че $\widehat{\mathscr{H}}$ е диференциален оператор. Връзката между $<x \mid \widehat{H} \mid x'>$ и алгебричния оператор $\widehat{\mathscr{H}}$ беше изяснявана вече в гл. 14, § 5.

Нашите резултати се нуждаят от уточнение. Ние предположихме, че амплитудата $\psi(x)=<x \mid \psi>$ е нормирана, т. е. маща бите са избрани така, че

$$\int |\psi(x)|^2 dx = 1$$

и вероятността електронът да се намери *където и да е*, равна на единица. Но вие бихте могли, ако искате, да работите с ненормирана функция $\psi(x)$; тогава би трябвало да се пише

$$<E>_{\text{ср}} = \frac{\int \psi^*(x)\, \widehat{H}\, \psi(x)\, dx}{\int \psi^*(x)\, \psi(x)\, dx}. \tag{18.29}$$

Това е едно и също.

Обърнете внимание на сходството между (18.28) и (18.18) При работа в x-представяне тези два начина на записване на един и същ резултат се срещат често. От първия може да се премине към втория, ако $\widehat{A}$ е *локален* оператор, т. е. такъв, че интегралът

$$\int <x \mid \widehat{A} \mid x'><x' \mid \psi>\, dx'$$

може да бъде записан във вида $\widehat{\mathscr{A}}\, \psi(x)$, където $\widehat{\mathscr{A}}$ е диференциален алгебричен оператор. Обаче има оператори, за които това не е вярно. Тогава се налага да работим с изходните уравнения (18.21) и (18.22).

Нашият извод лесно се обобщава за тримерния случай. Резултатът е такъв[1]

$$<E>_{\text{ср}} = \int \psi^*(\mathbf{r})\, \widehat{\mathscr{H}}\, \psi(\mathbf{r})\, d\ \text{Обем}, \tag{18.30}$$

където

$$\widehat{\mathscr{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}), \tag{18.31}$$

при което се подразбира, че

$$\int |\psi|^2\, d\ \text{Обем} = 1. \tag{18.32}$$

Подобни уравнения се получават по твърде очевиден начини при обобщаване за система с няколко електрона, но ние няма да се занимаваме сега с написването на резултатите.

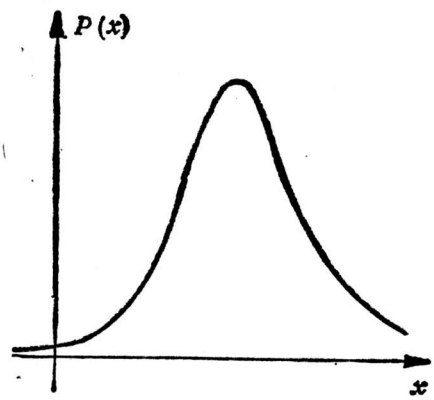
С помощта на (18.30) може да се пресметне средната енергия на атомното състояние даже без да се знаят енергетичните нива. Нужна е само вълновата функция. Това е много важен закон. Ще разкажем за едно негово интересно приложение. Нека вие искате да узнаете енергията на основното състояние на някаква система, да кажем на хелиевия атом, но вие се затруднявате да решите уравнението на Шрьодингер за вълновата функция поради големия брой на променливите. Да предположим обаче, че вие сте решили да опитате някаква вълнова функция (избирайки я по свое желание), за да пресметнете средната енергия. С други думи, вие използувате уравнението (18.29), обобщено за тримерния случай, за да узнаете каква би била средната енергия, ако атомът би бил наистина в състояние, описвано от тази вълнова функция. Получе-

[1] Обемния елемент означаваме с d Обем. Той просто е равен на $dx\, dy\, dz$, а интегрирането се извършва в граници от $-\infty$ до $+\infty$ по трите координати.

ната енергия безспорно ще се окаже по-голяма от енергията на основното състояние — най-ниската енергия, която може да има атомът[1]. Вземете сега нова функция и пресметнете новата средна енергия. Ако тя е по-малка, отколкото при първия ваш избор, значи вие сте се приближили до истинската енергия на основното състояние. Ако вие поразмислите малко, ще започнете да пробвате такива функции, в които има няколко свободни параметъра. Тогава енергията ще се изрази чрез тези параметри. Варирайки параметрите така, че да се получи най-ниската мислима енергия, вие по такъв начин ще изпробвате наведнъж цяла класа функции. Най-вероятно е да забележите, че става все по-трудно и по-трудно да се понижава енергията, т. е. ще започнете да се убеждавате в това, че вече сте се приближили съвсем плътно до най-ниската възможна енергия. Именно така е била решена задачата за атома на хелия — никакви диференциални уравнения не са били решавани, а само са били съставени особени функции с множество поддаващи се на нагласа параметри, които са били така подбрани, че да дават средна енергия с най-ниска стойност.

18-4. Оператор на мястото

Какво е средното положение на електрона в атома? Каква е средната стойност на координатата x в дадено състояние $|\psi>$? Да разгледаме едномерен случай, а обобщението за тримерен или за система с много частици ще остане за вас. Ние имаме състояние, което се описва от функцията $\psi(x)$ и измерваме последователно много пъти координатата x. Какво ще се получи за средната координата? Очевидно $\int x P(x)\,dx$, където $P(x)$ е вероятността за това електронът да се намери в малкия интервал dx около x. Нека плътността на вероятността $P(x)$ се изменя с x така, както е показано на фиг. 18.1. Най-вероятно е вие да намерите електрона някъде около максимума на кривата. Средната стойност на x също ще се получи някъде в областта около максимума, а по-точно именно в центъра на тежестта на площта, ограничена от кривата.



Фиг. 1∞1. Крива на плътността на вероятността, съответстваща на локализирана частица

Ние видяхме по-рано, че $P(x) = |\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\,\psi(x)$; следователно средната стойност на x може да се запише във вида

$$<x>_{ср} = \int \psi^*(x)\, x\, \psi(x)\, dx. \qquad (18.33)$$

Нашето уравнение за $<x>_{ср}$ има същия вид като (18.18). Когато ние пресмятахме средната енергия, поставяхме оператора $\hat{\mathscr{H}}$ между две функции ψ, а когато пресмятаме средното положение между функциите, поставяме просто x. (Ако искате, можете да разглеждате x като алгебричен оператор „умножаване с x“.) Този паралел може да се проведе още по-нататък, изразявайки средното местоположение във форма, която съответствува на уравнението (18. 18). Да предположим, че ние просто сме написали

$$<x>_{ср} = <\psi \mid \alpha>, \qquad (18.34)$$

където

$$|\alpha> = \hat{x}\,|\psi>, \qquad (18.35)$$

и да се опитаме да намерим такъв оператор $\hat{x}$, който да създава състоянието $|\alpha>$, при което уравнението (18.34) да не противоречи на уравнението (18.33). С други думи, ние трябва да намерим такова $|\alpha>$, че да имаме

[1] Това може да се изрази по друг начин. Каквато и функция (т. е. състояние) да изберем, тя винаги може да се представи във вид на линейна комбинация от базисните състояния, които са състояния с определена енергия. Тъй като в тази комбинация участвува смес от състояния с по-високи енергии, средната енергия ще се окаже по-голяма от енергията на основното състояние.

$$<\psi \mid \alpha> = <x>_{\text{ср}} = \int <\psi \mid x> x <x \mid \psi> \, dx. \qquad (18.36)$$

Да разложим най-напред $<\psi \mid \alpha>$ по x-представянето:

$$<\psi \mid \alpha> = \int <\psi \mid x> <x \mid \alpha> \, dx. \qquad (18.37)$$

След това сравняваме интегралите в (18.36) и (18.37). Вие виждате, че в *x-представянето* (*и само* в това представяне)

$$<x \mid \alpha> = x <x \mid \psi>. \qquad (18.38)$$

Действието на оператора $\hat{x}$ върху $\mid \psi>$ при получаване на $\mid \alpha>$ е равнозначно на умножаване с x на $\psi(x) = <x \mid \psi>$ при получаване на $\alpha(x) = <x \mid \alpha>$. Пред нас е определението на оператора $\hat{x}$ в координатно представяне[1].

(Ние не сме си поставяли за цел да получим x-представянето на матрицата на оператора $\hat{x}$. Ако вие сте честолюбиви, опитайте се да покажете, че

$$<x \mid \hat{x} \mid x'> = x \delta(x - x'). \qquad (18.39)$$

Тогава ще можете да докажете поразителната формула

$$\hat{x} - \hat{x} > = x \mid x>, \qquad (18.40)$$

т. е. че операторът $\hat{x}$ има интересно свойство: когато действува на базисното състояние $\mid x>$, това е равнозначно на умножаване с x.)

А може би вие искате да знаете средната стойност на x^2? Тя е равна на

$$<x^2>_{\text{ср}} = \int \psi^*(x) x^2 \psi(x) \, dx. \qquad (18.41)$$

Или ако желаете, можете да пишете и така

$$<x^2>_{\text{ср}} = <\psi \mid \alpha'>,$$

където

$$\mid \alpha'> = \hat{x^2} \mid \psi>. \qquad (18.42)$$

Под $\hat{x}^2$ се подразбира $\hat{x}\,\hat{x}$ — двата оператора се прилагат един след друг. С помощта на (18.42) може да се пресметне $<x^2>_{\text{ср}}$, като се използува какво да е представяне (базисно състояние). Ако вие искате да знаете средната стойност на x^n или на произволен полином на x, сега можете лесно да намерите това.

18-5. Оператор на импулса

Сега ние искаме да пресметнем средния *импулс* на електрона, започвайки отново с едномерния случай. Нека $P(p)\,dp$ е вероятността за това, че измерването ще даде импулс в интервала между p и $p+dp$. Тогава

$$<p>_{\text{ср}} = \int p P(p) \, dp. \qquad (18.43)$$

Да означим сега с $<p \mid \psi>$ амплитудата за това, че състоянието $\mid \psi>$ е състояние с определен импулс $\mid p>$. Това е същата амплитуда, която ние означавахме с $<$имп. $p \mid \psi>$ в гл. 14, § 3; тя е функция на p, както $<x \mid \psi>$ е функция на x. След това ние избираме такава нормировка на амплитудата, че да имаме

[1] Уравнението (18.38) *не означава,* че $\mid \alpha> = x \mid \psi>$ [ср. (18.35)]. Не може да се съкрати на $<x \mid$, тъй като множителят x пред $<x \mid \psi>$ има своя стойност за всяко състояние $<x \mid$. Това е стойността на координатата на електрона в състоянието $\mid x>$ [вж. (18.40)].

$$P(p)=\frac{1}{2\pi\hbar}\,|\,\langle p|\psi\rangle|^2. \tag{18.44}$$

Тогава се получава

$$\langle p\rangle_{\text{ср}}=\int \langle\psi\,|\,p\rangle p\langle p\,|\,\psi\rangle\,\frac{dp}{2\pi\hbar}, \tag{18.45}$$

което много прилича на това, което имахме за $\langle x\rangle_{\text{ср}}$.

При желание може да се продължи същата игра, на която ние се отдадохме в случая с $\langle x\rangle_{\text{ср}}$. Най-напред този интеграл може да се запише така

$$\int \langle\psi\,|\,p\rangle\langle p\,|\,\beta\rangle\,\frac{dp}{2\pi\hbar}. \tag{18.46}$$

Сега трябва да познаете в това уравнение разложението на амплитудата $\langle\psi\,|\,\beta\rangle$ — разложение по базисните състояния с определен импулс. От (18.43) следва, че в *импулсно представяне* състоянието $|\,\beta\rangle$ се определя от уравнението

$$\langle p\,|\,\beta\rangle=p\langle p\,|\,\psi\rangle. \tag{18.47}$$

С други думи можем да пишем

$$\langle p\rangle_{\text{ср}}=\langle\psi\,|\,\beta\rangle, \tag{18.48}$$

при което

$$|\,\beta\rangle=\hat{p}\,|\,\psi\rangle, \tag{18.49}$$

а операторът $\hat{p}$ се определя на езика на p-представянето (18.47)

[И отново при желание може да се покаже, че матрицата на $\hat{p}$ е следната

$$\langle p\,|\,\hat{p}\,|\,p'\rangle=p\,\delta(p-p') \tag{18.50}$$

и че

$$\hat{p}\,|\,p\rangle=p\,|\,p\rangle. \tag{18.51}$$

Това се извежда по същия начин, както за x].

Сега възниква един интересен въпрос. Ние можем да напишем $\langle p\rangle_{\text{ср}}$ така, както направихме това в (18.45) и (18.48); смисълът на оператора $\hat{p}$ в *импулсното представяне* също ни е известен. Но как да изтълкуваме $\hat{p}$ в *координатно представяне*? Това е необходимо да се узнае в случая, когато имаме вълновата функция $\psi(x)$ и искаме да пресметнем нейния среден импулс. Разрешете да поясним по-точно какво се има пред вид. Ако започнем с това, че зададем $\langle p\rangle_{\text{ср}}$ с уравнението (18.48), това уравнение може да се разложи по p-представянето и да се върнем към (18.45). Ако ни е дадено p-представянето на състоянието, а именно амплитудата $\langle p\,|\,\psi\rangle$ като алгебрична функция на p, от (18.47) можем да намерим $\langle p\,|\,\beta\rangle$ и да продължим пресмятането на интеграла. Въпросът сега е следният: какво да се прави, ако ни е дадено описание на състоянието в x-представяне, а именно вълновата функция $\psi(x)=\langle x\,|\,\psi\rangle$?

Нека да започнем с разложението на (18.48) в x-представяне. Можем да пишем

$$\langle p\rangle_{\text{ср}}=\int \langle\psi\,|\,x\rangle\langle x\,|\,\beta\rangle\,dx. \tag{18.52}$$

Но сега трябва да се знае друго: как изглежда състоянието $|\,\beta\rangle$ в x-представянето. Ако узнаем това, можем да пресметнем интеграла. И тъй, нашата задача е да намерим функцията $\beta(x)=\langle x\,|\,\beta\rangle$. Тя може да се намери по следния начин. Ние видяхме в гл. 14, § 3 как $\langle p\,|\,\beta\rangle$ е свързано с $\langle x\,|\,\beta\rangle$. Съгласно уравнението (14.24), имаме

$$<p \mid \beta> = \int e^{-i\,px/\hbar} <x \mid \beta>\, dx. \qquad (18.53)$$

Ако ни е известно $<p \mid \beta>$, решавайки това уравнение, ние ще намерим $<x \mid \beta>$. Но, разбира се, резултатът би следвало да се изрази някак чрез $\psi(x) = <x \mid \psi>$ понеже се счита, че именно тази величина ни е известна. Сега ще тръгнем от (18.47) и използувайки отново (14.24), можем да напишем

$$<p \mid \beta> = p<p \mid \psi> = p \int e^{-ipx/\hbar}\, \psi(x)\, dx. \qquad (18.54)$$

Интегрирането е по x, затова p може да се внесе под знака на интеграла; тогава

$$<p \mid \beta> = \int e^{-ipx/\hbar}\, p\, \psi(x)\, dx. \qquad (18.55)$$

Сега да сравним това с (18.53). Може би вие сте си помислили, че $<x \mid \beta>$ е равно на $p\,\psi(x)$? Не, напразно? Вълновата функция $<x \mid \beta> = \beta(x)$ може да зависи само от x, но не и от p. В това е цялата трудност.

За щастие някой забелязал, че интегралът в (18.55) може да се интегрира по части. Производната на $e^{-ipx/\hbar}$ по x е равна на $(-i/\hbar)\, p\, e^{-ipx/\hbar}$, затова този интеграл е равен на

$$-\frac{\hbar}{i} \int \frac{d}{dx} (e^{-ipx/\hbar})\, \psi(x)\, dx.$$

Ако сега интегрираме по части, получаваме израза

$$-\frac{\hbar}{i} \left[e^{-ipx/\hbar}\, \psi(x) \right]_{-\infty}^{+\infty} + \frac{\hbar}{i} \int e^{-ipx/\hbar}\, \frac{d\psi}{dx}\, dx.$$

Докато става дума само за свързани състояния, $\psi(x)$ се стреми към нула при $x \to \pm\infty$, скобката е равна на нула и ние имаме

$$<p \mid \beta> = \frac{\hbar}{i} \int e^{-ipx/\hbar}\, \frac{d\psi}{dx}\, dx. \qquad (18.56)$$

А сега да сравним този резултат с (18.53). Вие виждате, че

$$<x \mid \beta> = \frac{\hbar}{i}\, \frac{d}{dx}\, \psi(x). \qquad (18.57)$$

Ние имаме всичко необходимо за пресмятане на интеграла (18.52) Окончателният отговор е такъв

$$<p>_{ср} = \int \psi^*(x)\, \frac{\hbar}{i}\, \frac{d}{dx}\, \psi(x)\, dx. \qquad (18.58)$$

Сега вече знаем как изглежда (18.48) в координатно представяне.

Пред нас започва постепенно да се очертава интересна картина. Когато ние зададохме въпрос за средната енергия на състоянието $|\psi>$, отговорът беше такъв

$$<E>_{ср} = <\psi \mid \varphi>, \text{ където } |\varphi> = \hat{H} \mid \psi>.$$

Това същото в координатния свят се записва така

$$<E>_{ср} = \int \psi^*(x)\, \varphi(x)\, dx, \quad \text{където } \varphi(x) = \hat{\mathscr{H}}\, \psi(x).$$

Тук $\hat{\mathscr{H}}$ е *алгебричен* оператор, който действува на функцията x.

Когато ние зададохме въпроса за средната стойност на x, също забелязахме, че отговорът има вид

$$<x>_{ср} = <\psi \mid \alpha>, \text{ където } |\alpha> = \hat{x} \mid \psi>.$$

В координатния свят съответните уравнения са такива

$$\langle x\rangle_{\text{ср}}=\int \psi^*(x)\,\alpha(x)\,dx, \text{ където } \alpha(x)=x\,\psi(x).$$

Когато ние зададохме въпрос за средната стойност на p, отговорът се оказа

$$\langle p\rangle_{\text{ср}}=\langle\psi\,|\,\beta\rangle, \text{ където } |\beta\rangle=\hat{p}\,|\,\psi\rangle.$$

В координатния свят еквивалентните уравнения имат вид

$$\langle p\rangle_{\text{ср}}=\int \psi^*(x)\,\beta(x)\,dx, \text{ където } \beta(x)=\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\psi(x).$$

И в трите наши примера ние тръгвахме от състоянието $|\psi\rangle$ и създавахме ново (хипотетично) състояние с помощта на съответен *квантовомеханичен* оператор. В координатно представяне ние генерираме съответна вълнова функция, действувайки на вълновата функция $\psi(x)$ с *алгебричен* оператор. Може да се говори за взаимно еднозначно съответствие (за едномерните задачи) между

$$\hat{H} \text{ и } \hat{\mathscr{H}}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x).$$

$$\hat{x} \text{ и } x, \tag{18.59}$$

$$\hat{p}_x \text{ и } \hat{\mathscr{P}}_x=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}.$$

В този списък сме въвели новия символ $\hat{\mathscr{P}}_x$ за алгебричния оператор

$$\hat{\mathscr{P}}_x=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} \tag{18.60}$$

и сме поставили индекс x, за да помним, че все още имаме работа само с x-компонентата на импулса.

Този резултат лесно се обобщава за тримерния случай. За другите компоненти на импулса ще имаме

$$\hat{p}_y\to\hat{\mathscr{P}}_y=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_z\to\hat{\mathscr{P}}_z=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}.$$

При желание можем даже да говорим за вектор на импулса и да пишем

$$\hat{\mathbf{p}}\to\hat{\mathscr{P}}=\frac{\hbar}{i}\left(\mathbf{e}_x\frac{\partial}{\partial x}+\mathbf{e}_y\frac{\partial}{\partial y}+\mathbf{e}_z\frac{\partial}{\partial z}\right),$$

където $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$ и $\mathbf{e}_z$ са единичните вектори на трите посоки. Това може да се напише още по-изящно така:

$$\hat{\mathbf{p}}\to\hat{\mathscr{P}}=\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}. \tag{18.61}$$

Нашият окончателен извод е такъв: поне за някои квантовомеханични оператори съществуват съответни алгебрични оператори в координатно представяне. Всичко, което изведохме досега (заедно с това и за тримерния случай), е обобщено в табл. 18.1. Всеки оператор може да бъде представен в два равностойни вида[1]

$$|\varphi\rangle=\hat{A}\,|\,\psi\rangle \tag{18.62}$$

или

$$\varphi(\mathbf{r})=\hat{\mathscr{A}}\,\psi(\mathbf{r}). \tag{18.63}$$

Сега ние ще дадем няколко илюстрации на приложението на тези идеи. Най-напред ще изясним връзката между $\hat{\mathscr{P}}$ и $\hat{\mathscr{H}}$. Ако приложим $\hat{\mathscr{P}}_x$ два пъти, получаваме

---

[1] В много книги за $\hat{A}$ и $\hat{\mathscr{A}}$ се използува един и същ символ: физиката в тях е една и съща и е по-удобно да не се въвеждат нови букви. А от контекста винаги е ясно какво се има пред вид.

$$\hat{\mathcal{P}}_x\,\hat{\mathcal{P}}_x = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Това означава, че можем да напишем равенството

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m}\left\{\hat{\mathcal{P}}_x\hat{\mathcal{P}}_x + \hat{\mathcal{P}}_y\hat{\mathcal{P}}_y + \hat{\mathcal{P}}_z\hat{\mathcal{P}}_z\right\} + V(\mathbf{r}).$$

Или във векторни означения

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{1}{2m}\hat{\mathcal{P}}\cdot\hat{\mathcal{P}} + V(\mathbf{r}). \tag{18.64}$$

(Членовете в алгебричния оператор, над които няма символа за оператор $\hat{}$, означават просто умножение.) Това уравнение е много приятно; вие можете лесно да го запомните, ако не сте забравили още курса по класическа физика. Добре известно е, че (нерелативистичната) енергия се състои от кинетична енергия $p^2/2m$ плюс потенциална, а тук $\hat{\mathcal{H}}$ е също операторът на пълната енергия.

Този резултат прави толкова силно впечатление на някои деятели, че те започват да се стремят, каквото и да стане, да набият в главата на студента цялата класическа физика, преди да пристъпят към квантовата. (Ние мислим иначе!) Паралелите много често са лъжливи. Ако вие имате оператори, важен е редът на различните множители, а в класическите уравнения той не е съществен.

Таблица 18.1

Алгебрични оператори в координатно представяне

Физична величина	Оператор	Координатно представяне
Енергия	$\hat{H}$	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$
Положение	$\hat{x}$	$\hat{x}$
	$\hat{y}$	$\hat{y}$
	$\hat{z}$	$\hat{z}$
Импулс	$\hat{p}_x$	$\hat{\mathcal{P}}_x = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$
	$\hat{p}_y$	$\hat{\mathcal{P}}_y = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}$
	$\hat{p}_z$	$\hat{\mathcal{P}}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z}$

В гл. 15 ние определихме оператора $\hat{p}_x$ чрез оператора на отместването $\hat{D}_x$ [вж. формула (15.27)]:

$$|\psi'\rangle = \hat{D}_x(\delta)\,|\psi\rangle = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\hat{p}_x\delta\right)|\psi\rangle, \tag{18.65}$$

където δ е *малко* отместване. Трябва да покажем, че това определение е еквивалентно на нашето ново определение. В съответствие с това, което ние току-що доказахме, това уравнение трябва да означава съвсем същото като уравнението

$$\psi'(x) = \psi(x) + \frac{\partial\psi}{\partial x}\delta.$$

Но в дясната част стои просто разложение на $\psi(x+\delta)$ в ред на Тейлър, а $\psi(x+\delta)$ е точно това, което се получава, ако отместим състоянието наляво с δ (или ако отместим надясно също с толкова координатната система). Двете наши определения на $\hat{p}$ се съгласуват!

Да се възползуваме от това, за да докажем още някои неща. Нека имаме някаква сложна система с множество частици, които

ще номерираме с 1, 2, 3,... (За простота ще се спрем на едномерния случай.) Вълновата функция, описваща състоянието, е функция на всички координати x_1, x_2, x_3,.... Да я запишем във вида $\psi(x_1, x_2, \ldots)$. Отместваме сега координатната система (наляво) на разстояние δ. Новата вълнова функция

$$\psi'(x_1, x_2, x_3, \ldots) = \psi(x_1+\delta, x_2+\delta, x_3+\delta, \ldots)$$

може да бъде написана така

$$\psi'(x_1, x_2, x_3, \ldots) = \psi(x_1, x_2, x_3, \ldots) + \left\{ \delta \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + \delta \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + \right.$$
$$\left. + \delta \frac{\partial \psi}{\partial x_3} + \ldots \right\}. \qquad (18.66)$$

Съгласно уравнението (18.65) операторът на импулса на състоянието $|\psi>$ (да го наречем *пълен* импулс) е равен на

$$\hat{\mathcal{P}}_{\text{пл}} = \frac{\hbar}{i}\left(\frac{\partial}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x_2} + \frac{\partial}{\partial x_3} + \ldots\right).$$

Но това е все едно да напишем

$$\hat{\mathcal{P}}_{\text{пъл}} = \hat{\mathcal{P}}_{x_1} + \hat{\mathcal{P}}_{x_2} + \hat{\mathcal{P}}_{x_3} + \ldots \qquad (18.67)$$

Операторите на импулса се подчиняват на правилото, че пълният импулс е сума от импулсите на отделните части. Тука, както виждате, всичко се преплита чудесно и различните неща са във взаимно съгласие.

18-6. Момент на количеството на движение

От интерес ще разгледаме още една операция — операцията, която е свързана с орбиталния момент на количеството на движение. В гл. 15 определихме оператора J_z чрез $R_z(\varphi)$ — оператора на въртене на ъгъл φ около оста z. Да разгледаме сега система, описвана от една-единствена вълнова функция $\psi(\mathbf{r})$, която е функция само на координатите и не зависи от това, че спинът на електрона трябва да бъде насочен нагоре или надолу. Това означава, че ние искаме да пренебрегнем засега *вътрешния* момент на количеството на движение и сме решили да мислим само за *орбиталната* част. За да подчертаем разликата, ще означим орбиталния момент с $\hat{L}_z$ и ще го определим чрез оператора на въртене на безкрайно малък ъгъл ε с помощта на формулата

$$\hat{R}_z(\varepsilon)\,|\psi> = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\varepsilon\,\hat{L}_z\right)|\psi>$$

(*напомняме*: това определение е приложимо само за състояние $|\psi>$, което няма вътрешни спинови променливи, а зависи само от координатите $\mathbf{r}: x, y, z$). Ако ние погледнем състоянието $|\psi>$ от новата координатна система, която е завъртяна на малък ъгъл ε около оста z на старата система, ще видим ново състояние:

$$|\psi'> = \hat{R}_z(\varepsilon)\,|\psi>.$$

Ако ние сме решили да описваме състоянието $|\psi>$ в координатно представяне, т. е. с помощта на неговата вълнова функция $\psi(\mathbf{r})$, следва да се очаква такова равенство

$$\psi'(\mathbf{r}) = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\varepsilon\hat{L}_z\right)\psi(\mathbf{r}). \qquad (18.68)$$

Какво е $\hat{L}_z$? А ето какво. Точката $P(x, y)$ в *новата* координатна система (всъщност x', y', но ние не пишем примове) по-рано е имала координати $x-\varepsilon y$ и $y+\varepsilon x$ (фиг. 18.2). Тъй като амплитудата за това, че електронът ще се окаже в точка P, не се променя при завъртане на координатната система, можем да пишем

$$\psi'(x, y, z)=\psi(x+\varepsilon y, y-\varepsilon x, z)$$

$$=\psi(x, y, z)+\varepsilon y\frac{\partial\psi}{\partial x}-\varepsilon x\frac{\partial\psi}{\partial y}$$

(напомняме, че ε е малък ъгъл). Това означава, че

$$\hat{L}_z=\frac{\hbar}{i}\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right), \tag{18.69}$$

което е и нашият отговор. Обърнете внимание обаче, че определението (18.69) е еквивалентно с определението

$$\hat{L}_z=x\hat{\mathscr{P}}-y\hat{\mathscr{P}}_x. \tag{18.70}$$

Или ако се върнем към нашите квантовомеханични оператори, можем да пишем

$$\hat{L}_z=x\hat{\mathscr{P}}_y-y\hat{p}_x. \tag{18.71}$$

Фиг. 18.2. Въртене на координатната система около оста z на малък ъгъл ε

Тази формула лесно се помни, понеже прилича на познатата формула от класическата механика: това е z-компонентата на векторното произведение

$$\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}. \tag{18.72}$$

Една от забавните страни на манипулациите с операторите се състои в това, че много класически уравнения могат да се препишат в квантовомеханична форма. А кои не могат? Нали трябва да има такива, които не се получават, защото ако всичко би се повтаряло, в квантовата механика не би имало нищо, което да я отличава от класическата физика, не би имало нова физика.

Ето ви едно уравнение, което е различно в двата случая. В класическата физика имаме

$$xp_x-p_x x=0.$$

А какво е в квантовата механика?

$$\hat{x}\,\hat{p}_x-\hat{p}_x\,x=?$$

Да пресметнем това в x-представяне. За да се вижда какво правим, ще подействуваме с това на някоя вълнова функция $\psi(x)$. Пишем

$$x\hat{\mathscr{P}}_x\,\psi(x)-\mathscr{P}_x\,x\,\psi(x)$$

или

$$x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}x\,\psi(x).$$

Да си спомним сега, че операторът на производната действува на всичко, което е отдясно на него. Получаваме

$$x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}-\frac{\hbar}{i}\psi(x)-\frac{\hbar}{i}x\frac{\partial\psi}{\partial x}=-\frac{\hbar}{i}\psi(x). \tag{18.73}$$

Отговорът *не е* нула. Цялата операция просто се свежда до умножаване с $-\hbar/i$:

$$x\hat{p}_x-\hat{p}_x x=-\frac{\hbar}{i}. \tag{18.74}$$

Ако константата на Планк беше равна на нула, квантовите и класическите резултати биха били еднакви и не би ни се наложило да учим никаква квантова механика!

Ще отбележим, че ако два кои да е оператора $\hat{A}$ и $\hat{B}$, взети във вид на комбинацията

$$\hat{A}\,\hat{B}-\hat{B}\,\hat{A}$$

не дават нула, ние казваме, че операторите не комутират. Уравнение, подобно на (18.74), се нарича комутационно съотношение. Вие можете да се убедите сами, че комутационното съотношение за p_x и y (или комутаторът на p_x и y) има вида

$$\hat{p}_x y-y\hat{p}_x=0.$$

Има още едно много важно комутационно съотношение. То се отнася за моментите на количеството на движение. Видът му е такъв

$$\hat{L}_x \hat{L}_y - \hat{L}_y L_x = i\hbar \hat{L}_z. \tag{18.75}$$

Ако вие искате да придобиете известен опит в работата с операторите $\hat{x}$ и $\hat{p}$, опитайте се да докажете това равенство.

Интересно е да се отбележи, че некомутиращи оператори се срещат и в класическата физика. Ние вече се срещахме с тях, когато говорихме за въртене в пространството. Ако вие завъртите нещо, например книга, най-напред на 90° около оста y, а след това на 90° около оста x, ще се получи съвсем не това, което би се получило, ако най-напред бяхте я завъртели на 90° около оста x, а след това на 90° около оста y. Именно това свойство на пространството води до уравнението (18.75).

18-7. Изменение на средните с времето

Сега ще се запознаем с още един интересен въпрос: вие ще научите как средните стойности се изменят с времето. Да си представим за момент, че ние имаме един оператор $\hat{A}$, който не зависи явно от времето. Има се пред вид такъв оператор като $\hat{x}$ или $\hat{p}$. [Ние изключваме такива величини, като оператора на външния потенциал $V(x, t)$, който може да се изменя с времето.] Сега да си представим, че сме пресметнали $\langle A \rangle_{ср}$ в някакво състояние $|\psi\rangle$, т. е.

$$\langle A \rangle_{ср} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle. \tag{18.76}$$

Как $\langle A \rangle_{ср}$ зависи от времето? Но защо то въобще може да зависи от времето? Най-напред може да се случи, че операторът зависи сам от времето явно, ако той например е свързан с променлив потенциал от типа $V(x, t)$. Но даже ако операторът не зависи от t, какъвто е например операторът $\hat{A} = \hat{x}$, неговата средна стойност може да зависи от времето. Наистина средното положение на частицата може да се премества. Но как може да се получи такова движение от (18.76), ако $\hat{A}$ не зависи от времето? Работата е там, че с времето може да се измени само състоянието $|\psi\rangle$. Ние даже често пъти явно отбелязвахме зависимостта от времето за нестационарните състояния, записвайки ги във вида $|\psi(t)\rangle$. Сега ние искаме да покажем, че скоростта на изменение на $\langle A \rangle_{ср}$ се дава от нов оператор, който ще означим с $\hat{\dot{A}}$. Да напомним, че $\hat{\dot{A}}$ е оператор, така че точката над него въобще не означава диференциране по времето, а е просто начин за записване на *новия* оператор $\hat{A}$, който се определя от равенството

$$\frac{d}{dt}\langle A \rangle_{ср} = \langle \psi | \hat{\dot{A}} | \psi \rangle. \tag{18.77}$$

Нашата задача ще бъде да намерим $\hat{\dot{A}}$.

Преди всичко ние знаем, че скоростта на изменение на състоянието се дава от хамилтониана. Конкретно имаме

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle. \tag{18.78}$$

Това е само абстрактна форма на записване на нашето първоначално определение на хамилтониана

$$i\hbar \frac{dC_i}{dt} = \sum_j H_{ij} C_j. \tag{18.79}$$

Комплексно спрегнатото на това уравнение ще бъде еквивалентно с уравнението

$$-i\hbar \frac{d}{dt}<\psi(t) \mid = <\psi(t)|\hat{H}. \tag{18.80}$$

Да видим сега какво ще стане, ако диференцираме (18.76) по t. Тъй като всяко ψ зависи от времето t, имаме

$$\frac{d}{dt} <A>_{\text{ср}}=\left(\frac{d}{dt}<\psi \mid \right)\hat{A} \mid \psi>+<\psi \mid \hat{A}\left(\frac{d}{dt} \mid \psi>\right). \tag{18.81}$$

На края, замествайки производните с техните изрази (18.78) и (18.80) получаваме

$$\frac{d}{dt} <A>_{\text{ср}}=\frac{i}{\hbar}\{<\psi \mid \hat{H}\hat{A} \mid \psi>-<\psi \mid \hat{A}\hat{H} \mid \psi>\},$$

а това означава, че можем да напишем

$$\frac{d}{dt} <A>_{\text{ср}}=\frac{i}{\hbar}<\psi \mid (\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H}) \mid \psi>.$$

Сравнявайки това уравнение с (18.77), ние виждаме, че

$$\dot{\hat{A}}=\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H}). \tag{18.82}$$

Точно това е интересната формула, която ви обещахме да изведем; и тя е валидна за произволен оператор $\hat{A}$.

Впрочем да отбележим, че ако операторът $\hat{A}$ *сам* зависи от времето, бихме получили

$$\dot{\hat{A}}=\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{A}-\hat{A}\hat{H})+\frac{\partial \hat{A}}{\partial t}. \tag{18.83}$$

Да проверим (18.82), като вземем един пример, за да видим дали то има смисъл въобще. Какъв оператор например съответствува на $\dot{\hat{x}}$? Ние твърдим, че трябва да има място равенството

$$\dot{\hat{x}}=\frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{x}-\hat{x}\hat{H}). \tag{18.84}$$

Какво означава това? Един начин да се установи какво значи това, е да преминем в координатно представяне и да се възползуваме от алгебричния оператор $\hat{\mathscr{H}}$. В това представяне комутаторът е равен на

$$\hat{\mathscr{H}}\hat{x}-\hat{x}\hat{\mathscr{H}}=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right\}x - x\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right\}.$$

Ако вие подействувате с целия този израз на вълновата функция $\psi(x)$ и пресметнете производните навсякъде, където трябва, в края на краищата ще получите

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d\psi}{dx}.$$

Но това е същото като

$$-i\frac{\hbar}{m}\hat{\mathscr{P}}_x\psi,$$

така че ние виждаме, че

$$\hat{H}\hat{x}-\hat{x}\hat{H}=-i\frac{\hbar}{m}\hat{p}_x \tag{18.85}$$

или че

$$\dot{\hat{x}}=\frac{\hat{p}_x}{m}. \tag{18.86}$$

Чудесен резултат. Той означава, че ако средната стойност на x се изменя с времето, преместването на центъра на тежестта е равно на средния импулс, разделен с масата m. В класическата механика е точно така.

Друг пример. Каква е скоростта на изменение на средния импулс на състоянието? Правилата на игра са предишните. Операторът на тази скорост е равен на

$$\hat{\dot{p}} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{p} - \hat{p}\hat{H}). \tag{18.87}$$

Отново всичко може да се пресметне в x-представяне. Да напомним, че $\hat{p}$ се превръща в d/dx, а това означава, че на вас ще ви се наложи да диференцирате потенциалната енергия V (в $\hat{\mathscr{H}}$), но само във втората част на (18.87). В края на краищата остава само един член

$$\hat{\mathscr{H}}\hat{\mathscr{P}}_x - \hat{\mathscr{P}}_x\hat{\mathscr{H}} = +i\hbar\frac{dV}{dx}$$

или

$$\hat{\dot{p}} = -\frac{dV}{dx}. \tag{18.88}$$

Отново класически резултат. Отдясно стои силата, така че ние изведохме закона на Нютон! Но помнете — това са закони за *операторите*, които дават *средни* стойности. Те не описват детайлно процесите вътре в атома.

Съществената разлика на квантовата механика се състои в това, че $\hat{p}\hat{x}$ не е равно на $\hat{x}\hat{p}$. Те се различават много малко — само с малкото число $\hbar$. Но всички поразителни сложности на интерференция на вълните и подобни на нея ефекти произлизат от този дребен факт, че $\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}$ не в съвсем нула.

Историята на тази идея е също интересна. През 1926 г. с разлика от няколко месеца Хайзенберг и Шрьодингер независимо един от друг намират правилните закони, описващи атомната механика. Шрьодингер открива своята вълнова функция $\psi(x)$ и намира уравнение за нея, а Хайзенберг забелязва, че природата би могла да се опише и с класически уравнения, ако обаче $xp - px$ е равно на $\hbar/i$, което може да се постигне, като p и x се определят с помощта на особен вид матрици. Казано на нашия сегашен език, той използува енергетично представяне и неговите матрици. И едното, и другото — матричната алгебра на Хайзенберг и диференциалното уравнение на Шрьодингер — обясняват атома на водорода. Няколко месеца по-късно Шрьодингер успява да покаже, че двете теории са еквивалентни — ние току-що видяхме това. Но двете математически форми на квантовата механика са открити независимо.

19

Уравнение на Шрьодингер в класически контекст. Семинар по свръхпроводимост

19-1. Уравнение на Шрьодингер в магнитно поле

19-1. Уравнение на Шрьодингер в магнитно поле

19-2. Уравнение за непрекъснатост на вероятностите

19-3. Два рода импулси

19-4. Смисъл на вълновата функция

19-5. Свръхпроводимост

19-6. Явление на Майснер

19-7. Квантуване на потока

19-8. Динамика на свръхпроводимостта

19-9. Преходи на Джозефсон.

Аз ви чета тази лекция за развлечение. Иска ми се да видя какво ще се получи, ако започна да чета в малко по-друг стил. Тя не влиза в курса и не мислете, че правя опит да ви науча през последния час на нещо ново. Аз по-скоро си представям работата така, сякаш провеждам семинар, и като че ли правя отчет за някакви изследвания пред по-подготвена аудитория, пред хора, които вече разбират много неща от квантовата механика. Основното различие между семинара и редовната лекция се състои в това, че на семинар докладчикът не привежда всички стадии, цялата алгебра на пресмятанията. Той просто говори: „Ако вие направите това и това, ще се получи ето какво“, а в подробности не влиза. Ето и в тази лекция само ще се изказват идеи и ще се привеждат резултати от пресмятанията. А вие трябва да знаете, че съвсем не е обезателно всичко бързо и докрай да разберете; трябва само да се вярва, че ако се направят всички пресмятания, всичко така ще се и получи.

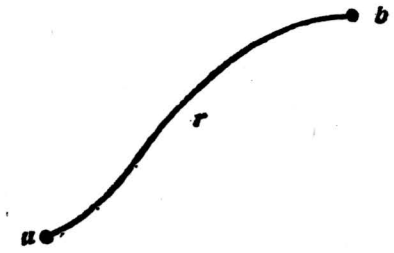
Но това не е всичко. Главното е въпросът, по който ми се *иска* да говоря. Това е такава свежа, актуална, съвременна тема, че е напълно законно да се изнесе пред семинар. Тази тема е: класически аспект на уравнението на Шрьодингер — явлението свръхпроводимост.

Обикновено тази вълнова функция, която се появява в уравнението на Шрьодингер, се отнася само за една или за две частици. И самата вълнова функция няма класически смисъл за разлика от електричното поле или векторния потенциал, или други подобни величини. Наистина вълновата функция на една отделна частица е „поле“ в този смисъл, че тя е функция на положението, но класически смисъл общо казано тя няма. Независимо от това понякога обстоятелствата се стичат така, че квантовомеханичната вълнова функция наистина придобива класически смисъл — именно тези случаи искам да засегна. Своеобразието на квантовомеханичното поведение на веществото в малки мащаби обикновено не може да бъде забелязано в едромащабните явления, ако не се считат стандартни изводите за това, че именно то поражда законите на Нютон, законите на т.нар. класическа механика. Но съществуват понякога обстоятелства, при които особеностите на квантовата механика могат да дадат своето отражение по особен начин в едромащабните явления.

При ниски температури, когато енергията на системата силно намалява, вместо предишното огромно количество състояния в игра се включват само много, много малко количество състояния — тези, които са разположени близо до основното. При такива условия квантовомеханичният характер на това основно състояние може да се прояви на макроскопично ниво. Ето и целта на тази лекция ще бъде да покаже връзката между квантовата механика и едромащабните ефекти — не обикновено обсъждане на пътищата, по които квантовата механика се възпроизвежда осреднено от нютоновата механика, а специален случай, когато квантовата механика предизвиква свои собствени, характерни за нея ефекти в едри, „макроскопични“ мащаби.

Ще започна с напомняне на някои свойства на уравнението на Шрьодингер[1]. Аз искам с помощта на уравнението на Шрьодингер

[1] Фактически това не е напомняне, защото някои от тези уравнения аз не съм привеждал по-рано; не забравяйте, че аз провеждам наистина семинар.



Фиг. 19.1. Амплитудата за преход от a в b по пътя r е пропорционална на

$$\exp\left\{-\frac{ip}{\hbar}\int_a^b \mathbf{A}\,.\,ds\right\}$$

да опиша поведението на частица в магнитно поле, понеже явлението свръхпроводимост е свързано с магнитни полета. Външното магнитно поле се описва от векторен потенциал и въпросът се състои в това, какви са законите на квантовата механика в поле на векторен потенциал. Принципът, определящ квантовомеханичното поведение на частица в полето на векторен потенциал, е много прост. Амплитудата за това, че частицата при наличие на поле ще премине по някакъв път от едно място на друго (фиг. 19.1) е равна на амплитудата за това, че тя би преминала по този път без поле, умножена на експонента с показател криволинейния интеграл от векторния потенциал, умножен от своя страна на електричния заряд, разделен с константата на Планк [вж. гл. 15, §2 (том II)]:

$$\langle b \mid a\rangle_{\text{в поле A}} = \langle b \mid a\rangle_{\mathbf{A}=0} \exp\left\{\frac{iq}{\hbar}\int_a^b \mathbf{A}\,.\,d\mathbf{s}\right\}. \qquad (19.1)$$

Това е основно твърдение в квантовата механика.

Когато векторният потенциал е равен на нула, уравнението на Шрьодингер за заредена частица (нерелативистична, безспинова) има вид

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{\mathscr{H}}\psi = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\psi + q\varphi\psi, \qquad (19.2)$$

където φ е електричният потенциал, така че $q\varphi$ е потенциалната енергия[1]. А уравнението (19.1) е равнозначно с твърдението, че в магнитно поле е нужно всеки един от градиентите в хамилтониана винаги да се заменя с градиент минус $\frac{iq}{\hbar}\mathbf{A}$, така че (19.2) се превръща в следното уравнение

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{\mathscr{H}}\psi = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}\right)\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\mathbf{A}\right)\psi + q\varphi\psi. \qquad (19.3)$$

Това е уравнението на Шрьодингер за частица със заряд q (нерелативистична, безспинова), движеща се в електромагнитно поле.

За да стане ясно, че то е правилно, аз искам да ви дам прост пример, когато вместо непрекъснатия случай имаме линия от атоми, разположени по оста x на разстояние b един от друг и амплитудата за това, че без поле електронът ще премине от един атом към друг е равна на K[2]. Тогава съгласно уравнението (19.1), ако имаме вектор-потенциал $A_x(x, t)$ по оста x, амплитудата за преминаване ще се измени в сравнение с това, което е било преди това; налага се тя да бъде умножена с $\exp[(iq/\hbar)A_x b]$ — експонента с показател, равен на произведението $iq/\hbar$, и векторния потенциал, интегриран от единия атом до другия. За простота ние ще пишем $(q/\hbar)A_x = f(x)$, тъй като A_x въобще зависи от x. Ако с $C(x) = C_n$ означим амплитудата за това, че електронът ще бъде намерен около атома n, разположен в точка x, скоростта на изменение на тази амплитуда ще се дава от уравнението

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}C(x) = E_0 C(x) - Ke^{-ibf(x+b/2)}C(x+b) - Ke^{+ibf(x-b/2)}C(x-b). \qquad (19.4)$$

В него има три части. Първо, електронът, който се намира в точка x, има някаква енергия E_0. Това както обикновено дава члена $E_0 C(x)$. След това имаме члена $-KC(x+b)$, т. е. амплитудата за това, че електронът на атома $n+1$, разположен в точка $x+b$, е отскочил една стъпка назад. Обаче ако това става при наличието на векторен потенциал, фазата на амплитудата трябва да се отмести съгласно правилото (19.1). Ако A_x не се

[1] Само, моля ви се, не бъркайте това φ с нашето предишно означение на състоянието с φ!

[2] K е същата величина, която в задачата за линейна решетка беше означена с буквата A (вж. гл. 11).

изменя забележимо от един атом до друг, интегралът може просто да се напише във вид на произведение на Ax в средната точка между атомите и разстоянието между тях. И тъй произведението на $iq/\hbar$ и интеграла е равно на $ibf\,(x+b/2)$. А щом електронът е преминал назад, аз отбелязвам такова фазово отместване със знак минус. Това дава втората част. И аналогично има някаква амплитуда за това, че електрон ще премине напред, но този път вече се взема векторният потенциал от другата страна на точка x на разстояние $b/2$ и се умножава с големината на разстоянието b. Това дава третата част. Сумарно се получава уравнение за амплитудата, която определя вероятността за това, че частицата в поле, характеризиращо се с векторен потенциал, ще се окаже в точка x.

Но по-нататък ние знаем, че ако функцията $C\,(x)$ е достатъчно плавна (ние разглеждаме дълговълново приближение) и ако придвижим атомите по-близо един до друг, уравнението (14. 4) (стр. 227) приблизително ще описва поведението на електрона във вакуум. Затова следващата крачка е разлагането на двете страни на (19. 4) в ред по степените на b, като b се счита много малко. Ако $b=0$ например, дясната част ще бъде равна просто на $(E_0-2K)\,C(x)$, така че в нулево приближение енергията е равна на E_0-2K. След това идва b в различни степени, но поради това, че знаците на експоненциалните показатели са противоположни, остават само четни степени. В крайна сметка, ако вие разложите в Тейлоров ред $C(x)$, $f\,(x)$ и експонентите и съберете след това членовете с b^2, ще получите

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial C(x)}{\partial t}=E_0C(x)-2KC(x)$$
$$-Kb^2[C''(x)-2if(x)C'(x)-if'(x)C(x)-f^2(x)\,C(x)] \qquad (19.5)$$

(чертичките отдясно горе на C и f означават диференциране по x)

Това ужасно натрупване на различни букви изглежда много сложно. Но математически то съвпада точно с уравнението

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial C(x)}{\partial t}=(E_0-2K)C(x)$$
$$-Kb^2\left[\frac{\partial}{\partial x}-if(x)\right]\left[\frac{\partial}{\partial x}-if(x)\right]C(x). \qquad (19.6)$$

Втората скобка, действувайки на $C(x)$, дава $C'(x)$ минус $if(x)C(x)$. Първата скобка, действувайки на тези два члена, дава член с $C''(x)$, член с първа производна на $f(x)$ и с първа производна на $C(x)$. А сега си спомнете, че решенията без магнитно поле (вж. гл. 11, § 3) описват частица с ефективна маса $m_{\text{еф}}$, която се определя с формулата

$$Kb^2=\frac{\hbar}{m_{\text{еф}}}.$$

Ако вие след това положите $E_0=2K$ и отново се върнете към $f(x)=(q/\hbar)A_x$, лесно ще се убедите, че (19.6) е същото като първата част на (19.3). [Произходът на члена с потенциална енергия е добре известен и аз няма да се занимавам с него.] Формулата (19.1), според която векторният потенциал умножава всички амплитуди с експоненциален множител, е равнозначна на правилото, че операторът на импулса $(\hbar/i)\,\nabla$ се заменя с $(\hbar/i)\nabla-q\,\mathbf{A}$, както и направихме в уравнението на Шрьодингер (19.3).

19-2. Уравнение за непрекъснатост на вероятностите

Сега преминавам към нов пункт. Важна страна на уравнението на Шрьодингер за отделна частица е идеята за това, че вероятността за намиране на частицата на дадено място се определя от квадрата на абсолютната стойност на вълновата функция. За квантовата механика е характерно също и това, че вероятността се запазва локално (т.е. на всяко отделно място). Когато веро-

ятността за намиране на електрона на дадено място намалява, а вероятността за намирането му на някакво друго място нараства (така че пълната вероятност не се изменя), то в пространството между тези две места трябва нещо да е станало. С други думи, електронът притежава непрекъснатост в този смисъл, че ако вероятността спада на едно място и се покачва на друго, между тези места трябва нещо да протича. Така ако вие поставите между тях преграда, това ще се отрази на вероятностите и те ще престанат да бъдат такива, каквито са били преди това. Следователно само запазването на вероятността не е още пълната формулировка на закона за запазване, така както само запазването на енергията не притежава такава дълбочина и не представлява такава значимост като локалното запазване на енергията [вж. гл. 27, § 1 (том II)]. Ако енергия се губи, на загубата трябва да съответствува изтичане на енергия от това място. Желателно е и за вероятността да се открие такъв „ток". Ние бихме желали да е така: ако някъде се измени плътността на вероятността (вероятността за намиране на нещо там в единица обем), да може да се счита, че тя е изтекла нанякъде или е придошла отнякъде. Такъв ток (на вероятността) би бил вектор, който би могъл да се тълкува по следния начин: неговата x-компонента е чистата вероятност (за секунда и в единица обем) за това, че частицата ще премине по направление на оста x през равнина, успоредна на равнината xy. Преминаването в посоката $+x$ се счита за положителен поток, а преминаването в обратна посока — за отрицателен поток.

Съществува ли такъв ток? Вие знаете, че плътността на вероятността $P(\mathbf{r},t)$ се изразява чрез вълновата функция съгласно формулата

$$P(\mathbf{r}, t)=\psi^*(\mathbf{r}, t)\ \psi(\mathbf{r}, t). \tag{19.7}$$

И ето аз питам: съществува ли такъв ток $\mathbf{J}$, че да има място уравнението

$$\frac{\partial P}{\partial t}=-\nabla\cdot\mathbf{J}? \tag{19.8}$$

Ако аз диференцирам равенството (19.7) по времето, ще получа отдясно два члена

$$\frac{\partial P}{\partial t}=\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}. \tag{19.9}$$

Сега вземете $\frac{\partial\psi}{\partial t}$ от уравнението на Шрьодингер — уравнение (19.3); освен това комплексно спрегнете това уравнение, т. е. изменете знака на всяко i; за да определите $\frac{\partial\psi^*}{\partial t}$.

Вие ще получите

$$\frac{\partial P}{\partial t}=-\frac{i}{\hbar}\left[\psi^*\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}-q\mathbf{A}\right)\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}-q\mathbf{A}\right)\psi+q\varphi\psi^*\psi\right.$$
$$\left.-\psi\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}+q\mathbf{A}\right).\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}+q\mathbf{A}\right)\psi^*-q\varphi\psi^*\psi\right]. \tag{19.10}$$

Членовете, съдържащи потенциалната енергия, и много други членове се унищожават. А това, което остава, наистина може да бъде написано във вид на пълна дивергенция. Цялото уравнение (19.10) е еквивалентно на уравнението

$$\frac{\partial P}{\partial t}=-\overrightarrow{\nabla}\cdot\frac{1}{2m}\left\{\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}-q\mathbf{A}\right)\psi+\psi\left(-\frac{\hbar}{i}\overrightarrow{\nabla}-q\mathbf{A}\right)\psi^*\right\}. \tag{19.11}$$

Не е чак толкова сложно, както изглежда на пръв поглед. Това е симетрична комбинация на ψ^*, умножено с някаква операция над ψ, плюс ψ, умножено с комплексно спрегнатата операция над ψ^*. Това просто е някаква величина, плюс комплексно спрегнатата ѝ величина, така че всичко заедно (както трябва и да бъде) е реално. Операцията се запомня така: вземаме оператора

$\hat{\mathscr{P}}$ минус q **A**. Токът от (19.8) може да се напише във вида

$$\mathbf{J}=\frac{1}{2}\left\{\left[\frac{\hat{\mathscr{P}}-q\mathbf{A}}{m}\psi\right]^{*}\psi+\psi^{*}\left[\frac{\hat{\mathscr{P}}-q\mathbf{A}}{m}\psi\right]\right\}. \tag{19.12}$$

Това е именно този ток, който удовлетворява уравнението (19.8).

Уравнението (19.8) показва, че вероятността се запазва локално. Ако частицата изчезне от една област, тя не може да се окаже в друга, без при това да не протича нещо между двете области. Представете си, че първата област се намира във вътрешността на една затворена повърхнина, която е толкова далече, че има нулева вероятност за намиране на електрона на нея. Пълната вероятност за намиране на електрона някъде във вътрешността на повърхнината е равна на обемния интеграл от $\hat{\mathscr{P}}$. Но съгласно теоремата на Гаус обемният интеграл от дивергенцията на **J** е равен на повърхнинния интеграл от **J**. Ако ψ е равно на нула на повърхнината, то (19.12) означава, че и **J** е нула; значи пълната вероятност за намиране на частицата във вътрешността на повърхнината не може да се изменя. Само тогава, когато част от вероятността достига до границата, някаква нейна част може да изтече навън. Ние имаме право да говорим, че тя изтича навън само през повърхнината и точно това е локално запазване на вероятността.

19-3. Два рода импулси

Уравнението за тока е твърде интересно, макар че понякога причинява немалко грижи. Ние бихме могли да считаме тока като нещо от рода на произведение на плътността на частиците и тяхната скорост. Плътността би била от вида $\psi^{*}\psi$, така че тук всичко е наред. Всеки член в (19. 12) напомня типичния израз за средната стойност на оператора

$$\frac{\hat{\mathscr{P}}-q\mathbf{A}}{m}. \tag{19.13}$$

Може би затова той би трябвало да се разглежда като скорост на потока? Но тогава излиза, че скоростта може да се свърже с импулса по два начина — нали с пълно право бихме могли да считаме, че скоростта е равна на импулса, делен на масата, т. е. на $\hat{\mathscr{P}}/m$. Тези две възможности се различават с векторния потенциал.

Оказва се, че същите две възможности се срещат и в класическата физика; в нея също е било намерено, че импулсът може да се определи по два начина[1]. Единият може да се нарече „кинематичен импулс“, но за постигане на абсолютна яснота в тази лекция аз ще го наричам „mv-импулс“. Това е импулсът, който се получава при умножаване на масата със скоростта. Другият е по-математически, по-отвлечен импулс, понякога наричан „динамичен импулс“; аз ще го наричам „p-импулс“. И тъй ние имаме две възможности:

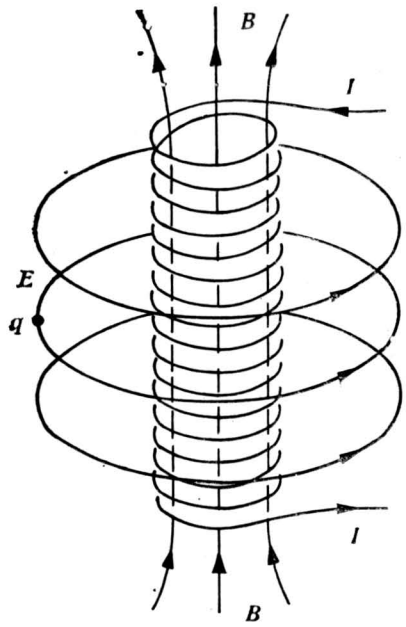
$$mv\text{-импулс}=m\mathbf{v}, \tag{19.14}$$

$$p\text{-импулс}=m\mathbf{v}+\mathbf{A}. \tag{19.15}$$

И ето, оказва се, че в квантовата механика, включваща магнитни полета, с оператора на градиента $\hat{\mathscr{P}}$, е свързан именно p-импулсът, така че операторът на скоростта е (19.13).

Тук аз бих искал малко да се отклоня от темата и да поясня защо се получава така, по какви причини в квантовата механика трябва да има нещо подобно на (19.15). Вълновата функция се

[1] Вж. например у. D. Yackson, Classical Electrodynamics, New York, 1962 (има руски превод: Д. Джексон, Классическая електродинамика, издат. „Мир“, 1965).



Фиг. 19.2 Електрично поле вън от соленоид, в който токът нараства

изменя с времето, следвайки уравнението на Шрьодингер (19.3). Ако аз внезапно бих изменил векторния потенциал, в първия момент след това вълновата функция не би се изменила, а би се изменила само скоростта на нейното изменение. Сега си представете какво ще се случи при следните обстоятелства. Нека имаме дълъг соленоид, в който аз създавам поток на магнитното поле (поле **B**), както е показано на фиг. 19.2. И нека близко до него да стои заредена частица. Да допуснем, че този поток нараства почти мигновено от нула до някаква стойност. Първоначално векторният потенциал е равен на нула, а после аз го включвам. Това означава, че аз създавам внезапно кръгов вектор-потенциал **A**. Вие помните, че криволинейният интеграл от **A** по затворен контур е равен на потока на полето **B** през контура [вж. гл. 14, § 1 (том II)]. И какво става, когато аз включвам мигновено векторния потенциал? Съгласно квантовомеханичното уравнение, внезапното изменение на A не предизвиква внезапно изменение на ψ; вълновата функция е все още същата. Значи и нейният градиент не се е изменил.

Но спомнете си какво става, когато аз внезапно включвам потока. В течение на кратък интервал от време, докато потокът расте, възниква електрично поле, контурният интеграл от което е равен на скоростта на изменение на потока с времето

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial A}{\partial t}. \tag{19.16}$$

Ако потокът рязко се изменя, то електричното поле достига огромна стойност и оказва силно действие на частицата. Тази сила е равна на произведението на заряда и електричното поле; следователно в момента на възникването на потока частицата получава възможния пълен импулс (т. е. изменението на $m\mathbf{v}$), равен на $-q\mathbf{A}$. С други думи, ако вие подействувате на заряда с векторен потенциал, включвайки го внезапно, този заряд незабавно ще приеме mv-импулс, равен на $-q\mathbf{A}$. Но има нещо, което не се изменя незабавно — това е разликата между $m\mathbf{v}$ и $-q\mathbf{A}$. Следователно сумата $\mathbf{p}=m\mathbf{v}+q\mathbf{A}$ е тази величина, която не се изменя, ако вие подлагате вектор-потенциала на внезапно изменение. Именно тази величина ние наричаме p-импулс и точно тя играе важна роля в класическата динамика; тя се оказва съществена и в квантовата механика. Тази величина зависи от характера на вълновата функция и се явява като приемник на оператора

$$\hat{\mathcal{P}} = \frac{\hbar}{i}\nabla$$

при наличието на магнитно поле.

19-4. Смисъл на вълновата функция

Когато Шрьодингер открил своето уравнение, той заедно с това установил, че законът за запазване (19.8) е следствие на неговото уравнение. Но той неправилно решил, че P е плътността на електричния заряд на електрона, а **J** — плътността на електричния ток, т. е. той мислел, че електроните взаимодействуват с електромагнитното поле посредством тези заряди и токове. Решавайки своите уравнения за атома на водорода и пресмятайки ψ, той не е търсил никакви амплитуди (по онова време още не е имало амплитуди), а тълкувал това съвсем по друг начин. Атомното ядро е било стационарно, около него са протичали токове; зарядите P и токовете **J** генерирали електромагнитни полета и всичко това заедно излъчвало светлина. Но скоро, решавайки задача след задача, той разбрал, че разсъждава не съвсем правилно. И точно в този момент Борн предложил една твърде нетривиална идея. Именно Борн правилно (доколкото ни е из-

вестно) отъждествил ψ в уравнението на Шрьодингер с амплитудата на вероятността, предполагайки, че квадратът на амплитудата не е плътността на заряда, а само вероятността (за единица обем) да се намери там електрон и че ако вие намирате електрон на някакво място, то там ще се окаже и целият негов товар. Тази идея изцяло принадлежи на Борн.

Вълновата функция $\psi(\mathbf{r})$ на електрона в атома следователно не описва размазан електрон с плавно изменяща се плътност на заряда. Електронът може да бъде или тук, или там, или още някъде, но където и да е, той винаги е точков заряд.

Но нека, от друга страна, да си представим случай, когато огромен брой частици се намират в едно и също състояние и голям брой от тях имат една и съща вълнова функция. Тогава какво? Една от тях ще бъде тук, друга — там и вероятността да намерим коя да е от тях на дадено място е пропорционална на $\psi\psi^*$. Но тъй като частиците са толкова много, ако погледна в някакъв обем $dxdydz$, аз изобщо ще видя там примерно $\psi\psi^* dxdydz$ частици. И тъй, когато ψ е вълнова функция на всяка една от огромното количество частици, поголовно намиращи се в едно или в друго състояние, то в този случай $\psi\psi^*$ *може* да се отъждестви с плътността на частиците. Ако при тези условия всички частици имат еднакви заряди q, ние можем да отидем понататък и да отъждествим $\psi\psi^*$ с плътността на *електричеството*. Обикновено $\psi\psi^*$ има размерност на вероятностна плътност, така че $\psi\psi^*$ трябва да се умножи с q, за да се получи размерност на зарядова плътност. За нашите сегашни цели ние можем да включим този постоянен множител в ψ и да приемем за плътност на електричния заряд самото произведение $\psi\psi^*$. Ако помним за това, то векторът $\mathbf{J}$ (оня ток на вероятността, който аз пресметнах) може да бъде считан просто за плътност на електричния ток.

И тъй, когато в едно и също състояние могат да се намират твърде много частици, възможно е друго тълкуване на вълновите функции. Плътността на заряда и електричният ток могат да бъдат изчислени направо от вълновите функции и вълновите функции придобиват физически смисъл, който се разпространява за класически, макроскопични ситуации.

Нещо подобно може да се случи и с неутралните частици. Ако ние имаме вълновата функция на отделния фотон, тя ни дава амплитудата за това, че той може да бъде намерен някъде. Въпреки че ние не сме го писали досега, обаче съществува уравнение за фотонната вълнова функция, аналогично на уравнението на Шрьодингер за електрона. Фотонното уравнение просто съвпада с уравненията на Максвел за електромагнитното поле, а вълновата функция — с векторния потенциал $\mathbf{A}$. Оказва се, че вълновата функция съвпада с обикновения векторен потенциал. Физиката на светлинните кванти съвпада с класическата физика, тъй като фотоните са невзаимодействуващи бозе-частици и много от тях могат да се намират в еднакви състояния; нещо повече, както вие знаете, те *охотно* заемат едно и също състояние. В момента, когато огромен брой от тях се окажат в едно и също състояние (т. е. в една и съща електромагнитна вълна), вие можете непосредствено да измерите вълновата функция (т. е. векторният потенциал.) Разбира се, исторически всичко е вървяло по друг път. Първите наблюдения са били проведени при такива обстоятелства, когато много фотони се намират в едно и също състояние и по този начин станало възможно да се открие правилното уравнение за отделния фотон, просто като се наблюдава непосредствено природата на вълновата функция на макроскопично ниво.

Трудността с електрона се състои в това, че вие не можете да поместите в едно и също състояние повече от един електрон. Затова много дълго се е считало, че вълновата функция в уравнението на Шрьодингер никога няма да има макроскопично представяне, подобно на макроскопичното представяне на фотонната амплитуда. Но сега вече е ясно, че явлението свръхпроводимост представлява именно такъв случай.

19-5. Свръхпроводимост

Вие знаете, че много метали при температура, по-ниска от една определена (за всеки метал температурата е отделна) стават свръхпроводящи[1]. Ако вие понижите температурата както следва, металите се превръщат в проводници на електричеството без съпротивление. Това явление е наблюдавано при твърде много метали, но не при всички и неговата теория е причинила немалко грижи. Нужно е било да мине доста дълго време, за да се разбере какво произлиза във вътрешността на свръхпроводника и аз ще опиша тук само онова, което е нужно за нашите сегашни цели. Оказва се, че поради взаимодействието на електроните с трептенията на атомите в решетката възниква слабо ефективно *привличане* между електроните. Грубо казано, електроните в резултат на това взаимодействие образуват свързани двойки.

Известно е също тъй, че всеки отделен електрон е ферми-частица. Но свързаната двойка ще има поведение на бозе-частица, понеже ако аз транспонирам двата електрона на двойката с друга двойка електрони, аз изменям два пъти знака на вълновата функция, а това означава, че нищо не изменям. Двойката е бозе-частица.

Енергията на сдвояване (енергията на привличане на електроните) е много, много слаба. Достатъчно е малко да се повиши температурата и топлинното възбуждане разпръсква електроните, превръщайки ги в „нормални“ електрони. Но ако температурата се понижи достатъчно силно, тези електрони ще направят всичко, което зависи от тях, за да заемат най-ниското енергетично състояние и тогава действително ще се подредят по двойки.

Аз не бих искал вие да си въобразявате, че двойките всъщност наистина са свързани много тясно, като точкови частици. В действителност именно в този пункт е била и най-голямата трудност в разбирането на това явление на първо време. Двата електрона, образуващи двойката, в действителност са отдалечени на забележими разстояния; и средното разстояние между двойките е по-малко от размера на отделната двойка. Няколко двойки едновременно заемат един и същи обем. Обясняването на причините за образуване на двойки електрони в метала и оценката на енергията, отделяна при образуването на двойките, е триумф на съвременната наука. Този фундаментален факт в явлението свръхпроводимост е разяснен най-напред в теорията, създадена от Бардин, Купер и Шрифер[1]. Но не това ще бъде темата на нашия семинар. Ние просто ще приемем като дадена представата за това, че електроните така или иначе действуват по двойки, че можем да считаме, че тези двойки имат повече или по-малко поведение на частици и че затова може да се говори за вълнова функция на „двойката“.

Уравнението на Шрьодингер за двойката прилича малко или много на (19.3). Единствената разлика се състои в това, че зарядът q ще бъде равен на удвоения заряд на електрона. Освен това ние не знаем инерцията (или ефективната маса) на двойката в решетката на кристала, затова не е известно какво число да поставим вместо m. Не бива също да се счита, че ако преминем към много високи честоти (или къси вълни), формата на уравнението ще остане правилна — кинетичната енергия, която съответствува на рязко изменящи се вълнови функции, може да нарасне до такава степен, че да разрушим двойката. При крайна температура в съответствие с теорията на Болцман винаги има някакво количество разрушени двойки. Вероятността за това, че двойката ще се разруши, е пропорционална на $\exp(-E_{\text{двойка}}/kT)$.

---

[1] Най-напред това открива Онес в 1911 г. [H. K. Onnes Comm. Phys Lab.' Univ. Leyden, № 119, 120, 122 (1911)]. Прекрасно съвременно изложение на предмета вие ще намерите в книгата на E. A. Lynton, Superconductivity, New York, 1962 (има руски превод: Е. Линтон, Сверхпроводимость, М., 1964).

[2] Y. Bardeen, L. N. Cooper, Y. R. Schrieffer, Phys. Rev. 108, 1175 (1957) (вж. превод в сборника „Теория сверхпроводимости“ ИЛ., 1960).

Несвързаните в двойки електрони се наричат „нормални“ и се движат из кристала по обикновен начин. Аз обаче ще разгледам само случаи на чисто нулева температура или във всеки случай ще пренебрегвам усложненията, предизвикани от тези електрони, които не са сдвоени.

Щом електронните двойки са бозони, когато едно множество от тях се окаже в едно състояние, амплитудата за преход на други двойки в същото състояние става особено голяма. Значи при най-ниска енергия почти всички двойки ще се съберат *съвсем точно в едно и също състояние* и много трудно е някоя от тях да излезе от това състояние. У всяка двойка амплитудата за това, че тя ще премине в заето състояние, е $\sqrt{n}$ пъти по-голяма, отколкото че ще премине в незаето (добре известният фактор $\sqrt{n}$ определя населеността n на най-ниското състояние). Значи ние имаме право да очакваме, че всички двойки ще се придвижат в едно и също състояние.

Как ще изглежда нашата теория в такъв случай? Аз ще означа с ψ вълновата функция на двойката в най-ниско енергетично състояние Обаче поради това, че $\psi\psi^*$ ще се окаже пропорционално на плътността на заряда ρ, аз с еднакво право мога да запиша ψ като квадратен корен от плътността на заряда, умножен с някакъв фазов множител, т. е.

$$\psi(\mathbf{r})=\sqrt{\rho(\mathbf{r})}e^{i\theta(\mathbf{r})}, \tag{19.17}$$

където ρ и θ са реални функции на $\mathbf{r}$. (Естествено в такъв вид може да се представи всяка комплексна функция.) Какво разбираме ние, говорейки за плътност на заряда, е ясно, но какъв е физическият смисъл на фазата θ на вълновата функция? Нека да видим какво ще се получи, ако заместим $\psi(\mathbf{r})$ от (19.17) в (19.12) и изразим плътността на тока с помощта на тези нови променливи ρ и θ. Това е проста замяна на променливите и без да повтаряме всички пресмятания, аз ще приведа резултата

$$\mathbf{J}=\frac{\hbar}{m}(\nabla\theta-\frac{q}{\hbar}\mathbf{A})\rho. \tag{19.18}$$

Тъй като и плътността на тока, и плътността на заряда за свръхпроводящия електронен газ имат пряк физически смисъл, то ρ и θ са напълно реални неща. Фазата е също тъй наблюдаема, както и ρ: това е част от плътността на тока $\mathbf{J}$. *Абсолютната* фаза е ненаблюдаема, но ако градиентът на фазата е известен във всички точки, фазата е известна с точност до константа. И ако вие определите по желание фазата в една точка, то във всички останали точки тя ще се определи сама по себе си.

Впрочем да отбележим, че на уравнението за тока може да се направи и по-изящен анализ, ако си представим, че плътността на тока *наистина* съвпада с произведението на зарядовата плътност и скоростта на електронната течност, т. е. че $\mathbf{J}=\rho\mathbf{v}$. Тогава (19.18) е равнозначно с уравнението

$$m\mathbf{v}=\hbar\nabla\theta-q\mathbf{A}. \tag{19.19}$$

Ние забелязваме, че в $m\mathbf{v}$-импулса има две части: едната е свързана с векторния потенциал, а другата — с поведението на вълновата функция. С други думи, величината $\hbar\nabla\theta$ е точно това, което ние нарекохме p-импулс.

19-6. Явление на Майснер

Сега вече може да се разкаже нещо и за явлението свръхпроводимост. Преди всичко при него липсва електрично съпротивление. А съпротивление няма, поради това че електроните пребивават колективно в едно и също състояние. При обикновено протичане на тока ту един електрон, ту друг излиза от рав-

номерния поток, постепенно разрушавайки пълния импулс. Тук не е така просто да се попречи на един електрон да прави това, което правят и другите, тъй като всички бозе-частици се стремят да попаднат в едно и също състояние. Ако токът веднъж е протекъл, това вече е завинаги.

Лесно е също да се разбере, че ако вие имате парче метал в свръхпроводящо състояние и включите не много силно магнитно поле (въпросът за това, какво ще стане, ако полето е силно, ние ще заобиколим мълчаливо), то няма да може да проникне в метала. Ако в момента на създаването на магнитното поле, макар някаква негова част да би нараснала във вътрешността на метала, в него би се появила скорост на изменение на потока, а в резултат на това и електрично поле, което на свой ред би предизвикало незабавно електричен ток, който по закона на Ленц би бил насочен така, че да намалява потока. А щом всички електрони се движат заедно, безкрайно малко електрично поле вече създава достатъчен ток, който напълно се съпротивлява на възникването на какво да е магнитно поле. Значи, ако вие включите поле, след като сте охладили метала до свръхпроводящо състояние, полето в никакъв случай не може да проникне във вътрешността на метала.

Още по-интересно е друго свързано с това явление, открито експериментално от Майснер[1]. Ако вие имате парче метал при висока температура (т. е. обикновен проводник) и в него сте създали магнитно поле, а след това сте понижили температурата под критичната (когато металът става свръхпроводник), *полето ще бъде изтласкано*. С други думи, в свръхпроводника възниква свой собствен ток, и то точно с такава сила, че да изтласква магнитното поле навън.

Причината за това може да се разбере от уравненията и аз сега ще обясня как. Нека имаме хомогенно парче свръхпроводящ материал (без отверстия). Тогава във всяко установено положение на покой дивергенцията на тока трябва да бъде равна на нула, защото той няма накъде да тече. Удобно е да се избере дивергенцията на **A** равна на нула. (Разбира се, би следвало да се обясни защо приемането на това съглашение не означава нарушаване на общността, но аз не искам да губя време за това). Ако вземем дивергенцията от (19.18), в крайна сметка ще се окаже, че лапласианът на θ трябва да бъде равен на нула. Но почакайте! Тогава какво става с изменението на ρ? Аз забравих да спомена нещо важно. В метала съществува фон от положителни заряди (поради наличието на атомни йони на решетката). Ако плътността на заряда е хомогенна, няма да има нито остатъчен заряд, нито електрично поле. Ако в дадено място биха се натрупали електрони, техният заряд не би бил неутрализиран и би възникнало силно отблъскване, което би разпръснало електроните из целия метал[2]. Значи при обикновени условия плътността на електронния заряд в свръхпроводниците е почти идеално хомогенна и аз имам право да считам, че ρ е постоянно. По-нататък единствената възможност величината $\nabla^2\theta$ да бъде равна на нула навсякъде в непрекъснатото парче метал е θ да бъде постоянна величина. А това означава, че **J** не влиза член с p-импулс. Съгласно израза (19.18) токът е пропорционален на ρ, умножено с **A**. Следователно в парчето свръхпроводящ материал токът по необходимост ще бъде пропорционален на вектор-потенциала

$$\mathbf{J} = -\rho \frac{q}{m} \mathbf{A}. \tag{19.20}$$

[1] W. Meissner, R. Ochsenfeld, Naturwiss., 21, 787 (1933).

[2] В действителност, ако електричното поле би се оказало твърде силно, двойките биха се разкъсали и сред появилите се „нормални" електрони би възникнало движение за неутрализиране на всякакви излишни положителни заряди. Но все пак за образуването на тези нормални електрони би потрябвала енергия, така че основната мисъл, съдържаща се в това, че почти хомогенната плътност ρ е много изгодна енергетически, остава справедлива.

Знаците на p и q са еднакви (отрицателни) и тъй като ρ е постоянна величина, аз мога да положа $\rho q/m = -$(някаква константа). Тогава

$$\mathbf{J} = -(\text{някаква константа})\ \mathbf{A}. \tag{19.21}$$

Това уравнение е било предложено най-напред от братята Лондон[1] с цел да се обяснят експерименталните резултати от наблюденията на свръхпроводимостта дълго преди хората да си изяснят квантовомеханичния произход на ефекта.

Ние сега можем да заместим (19.20) в уравненията на Максвел и да определим полето. Векторният потенциал е свързан с плътността на тока чрез уравнението

$$\nabla^2\mathbf{A} = -\frac{1}{\varepsilon_0 c^2}\mathbf{J}. \tag{19.22}$$

Ако тук аз заместя $\mathbf{J}$ съгласно (19.21), ще получа

$$\nabla^2\mathbf{A} = \lambda^2\mathbf{A}, \tag{19.23}$$

където λ^2 е нова константа, за която имаме

$$\lambda^2 = \rho\frac{q}{\varepsilon_0 mc^2}. \tag{19.24}$$

Сега можем да се опитаме да решим това уравнение спрямо $\mathbf{A}$ и да видим по-подробно какво става. Например в едномерния случай (19.23) има експоненциални решения от вида $e^{-\lambda x}$ и $e^{+\lambda x}$. Тези решения означават, че векторният потенциал трябва да *намалява* експоненциално с отдалечаването от повърхнината към вътрешността на разглеждания образец. (Той не може да нараства — би се получил взрив.)

Ако металното парче е много голямо в сравнение с $1/\lambda$, полето прониква навътре под повърхността само в един тънък слой с дебелина около $1/\lambda$. В цялото останало пространство във вътрешността на проводника няма да има поле, както е показано на фиг. 19.3. С това се и обяснява ефектът на Майснер.

Каква е тази „дълбочина на проникването“ $1/\lambda$? Вие помните че r_0 — „електромагнитният радиус“ на електрона ($2{,}8 \cdot 10^{-13}$ cm) — се дава с формулата

$$mc^2 = \frac{q_e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_0}.$$

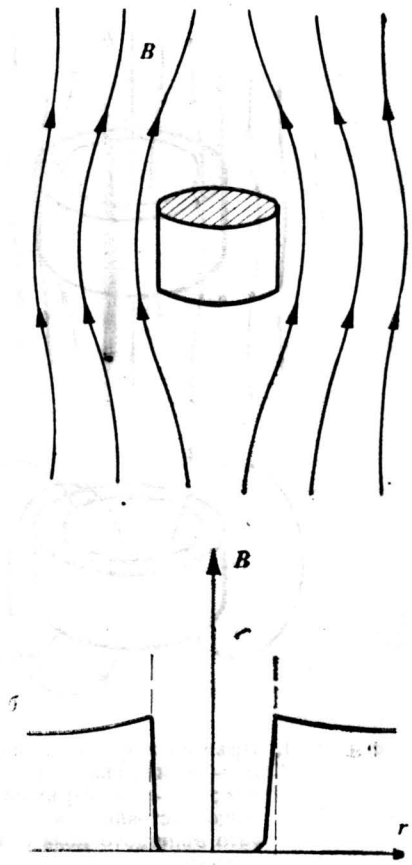
Вие помните също, че q е два пъти по-голямо от заряда на електрона, така че

$$\frac{q}{\varepsilon_0 mc^2} = \frac{8\pi r_0}{q_e}.$$

Записвайки ρ във вида $q_e N$, където N е броят на електроните в един кубичен сантиметър, ние получаваме

$$\lambda^2 = 8\pi N r_0. \tag{19.25}$$

За такъв метал като оловото във всеки кубичен сантиметър има $3 \cdot 10^{22}$ атома и ако всеки атом дава в случая по един електрон на проводимост, то $1/\lambda$ ще бъде от порядъка на $2 \cdot 10^{-5}$ cm. Това ви дава и порядъка на ефекта.

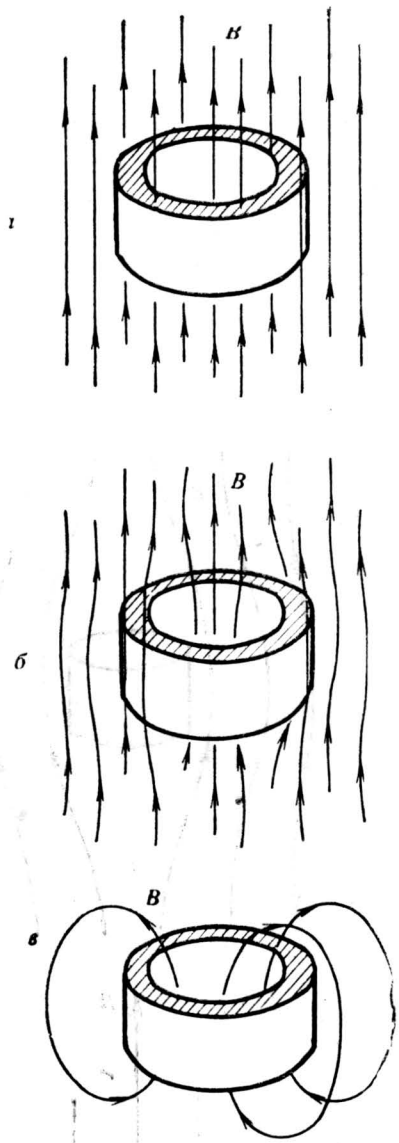


Фиг. 19.3. Свръхпроводящ цилиндър в магнитно поле (a) и магнитното поле $\mathbf{B}$ като функция на r ($б$)

19.7. Квантуване на потока

Уравнението на братя Лондон (19.21) е било предложено, за да се обяснят явленията, наблюдавани при свръхпроводимостта, включвайки и ефекта на Майснер. В последно време обаче бяха направени още по-поразителни предсказания. Едно от предсказанията на братя Лондон било толкова своеобразно, че никой не му обърнал особено внимание. Аз искам да разкажа за него. Този път ще *вземем* свръхпроводящ пръстен, дебелината на който

[1] H. London, F. London, Proc. Roy. Soc. (London), A 149. 71(1935); Physica, **2**, 341 (1935).



Фиг. 19.4. Пръстен в магнитно поле: *а* — в нормално състояние; *б* — в свръхпроводящо състояние; *в* — след като външното поле е премахнато

е голяма в сравнение с $1/\lambda$. Искаме да видим какво става, ако най-напред поставим пръстена в магнитно поле, след това го охладим до свръхпроводящо състояние, а след това премахнем първоначалното поле **B**. Последователността на тези събития е представена на фиг. 19.4. В нормално състояние (фиг. 19.4, *а*) във вътрешността на пръстена има магнитно поле. Когато пръстенът се превърне в свръхпроводник, полето (както вече знаем) се изтласква от веществото на пръстена. Но тогава остава известен поток на полето през отвора на пръстена. Ако сега отстраним външното поле, тези линии, които са минавали през отвора, ще останат „замразени" (фиг. 19.4, *в*). Потокът Φ през центъра не може да изчезне, защото $\partial\Phi/\partial t$ трябва през цялото време да е равно на контурния интеграл от E по дължината на пръстена, а E във вътрешността на свръхпроводника е равно на нула. И когато ние премахнем външното поле, в пръстена започва да тече ток на свръхпроводимост, ролята на който е да запази потока през пръстена неизменен. (Това е старата идея за вихровите токове, приложени за случая с нулево съпротивление.) Но всичките тези токове ще текат само близко до повърхността на пръстена (на дълбочина, не по-голяма от $1/\lambda$), което следва от също такъв анализ, като направения за хомогенен свръхпроводник. Тези токове протичат точно така, че магнитното поле да не попада във вътрешността на пръстена, а през цялото време да се задържа около него.

Тук обаче има съществена разлика и нашите уравнения предсказват поразителен ефект. Разсъждението за това, че фазата θ в хомогенното парче трябва да бъде постоянна в случая с *пръстена е неприложимо*; следните разсъждения ще ви помогнат да се убедите в това.

Далеч в дълбочината на пръстеновидното тяло плътността на тока **J** е равна на нула; следователно, (19.18) означава, че

$$\hbar\nabla\theta = q\,\mathbf{A}. \tag{19.26}$$

Сега да видим какво ще получим, ако пресметнем контурния интеграл от **A** по кривата Γ, която преминава точно в центъра на напречното сечение на пръстена, без да се доближава някъде до повърхнината (фиг. 19.5). От (19.26) имаме

$$\hbar\oint \nabla\theta\,.\,d\mathbf{s} = q\oint \mathbf{A}\,.\,d\mathbf{s}. \tag{19.27}$$

Вие знаете, че контурният интеграл от **A** по коя да е затворена крива е равен на потока Φ през затворената крива, т. е.

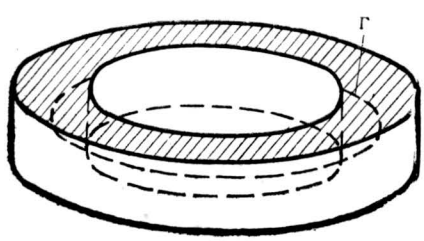
$$\oint \mathbf{A}\,.\,d\mathbf{s} = \Phi.$$

Следователно уравнението (19.27) се превръща в

$$\oint \nabla\theta\,.\,d\mathbf{s} = \frac{q}{\hbar}\,\Phi. \tag{19.28}$$

Криволинейният интеграл от една точка до друга (да речем, от точка 1 до точка 2) от градиента е равен на разликата от стойностите на функцията в тези две точки:

$$\int_1^2 \nabla\theta\,.\,d\mathbf{s} = \theta_2 - \theta_1.$$



Фиг. 19.5. Кривата Γ във вътрешността на свръхпроводящ пръстен

Ако започнем да доближаваме точките 1 и 2, за да получим затворена крива, като че ли най-естествено е да се очаква θ_1 да стане равно на θ_2, така че и интегралът в (19.28) става равен на нула. Така би било в случай на затворени криви в едносвързан свръхпроводник, но за пръстеновиден това не е обезателно. Единственото физическо изискване, което вие имате право да предявите, е *вълновата функция да приема само една стойност във всяка точка.* Каквото и да става с фазата когато се движите из пръстена, важното е когато се върнете в началната точка фазата да ви осигурява предишната стойност на вълновата функция

$\psi=\sqrt{\rho}\,e^{i\theta}$. Това е така, ако измененията на θ са от вида $2\pi n$, където n е произволно цяло число. И тъй, ако ние направим един пълен оборот около пръстена, лявата част на (19.27) трябва да бъде равна на $\hbar.2\pi n$.

Като заместим това в (19.28), получаваме

$$2\pi n\,\hbar=q\Phi. \tag{19.29}$$

Обхванатият от пръстена поток трябва да бъде винаги кратен на числото $2\pi\hbar/q$! Ако пръстенът беше класически обект с идеална (т.е. безкрайна) проводимост, би могло да се помисли, че целият преминаващ през него поток трябва да остава обхванат там такъв, какъвто и да е той, т.е. възможно е замразяването на поток с произволна големина. Но квантовомеханичната теория на свръхпроводимостта твърди, че потокът може да бъде или нула, или $2\pi\hbar/q$, или $4\pi\hbar/q$, или $6\pi\hbar/q$ и т.н. не и междинно число. Той е длъжен да бъде кратен на една фундаментална квантовомеханична константа.

Лондон[1] предсказва, че потокът, обхванат от свръхпроводящ пръстен, трябва да бъде квантуван, като допустимата големина на този поток се дава от уравнението (19.29), където q е равно на заряда на електрона q_e. Съгласно теорията на Лондон фундаменталната единица на потока е равна на $2\pi\hbar/q_e$, т.е. тя е около 4.10^{-7} Gs. cm^2. За да си представите нагледно тази величина, мислете си за едно тънко цилиндърче с дебелина една десета част от милиметъра; магнитното поле в цилиндърчето, ако то обхваща поток, равен на една фундаментална единица, ще бъде равно примерно на един процент от магнитното поле на Земята. Такъв поток може да се зарегистрира с помощта на чувствителни магнитни измервания.

В 1961 г. Дивер и Фейрбенк[2] от Станфордския университет поставят експеримент за измерване на квантувания поток и установяват неговото съществуване; примерно по същото време Дол и Набауер[3] в Германия получават същия резултат.

В опита на Дивер и Фейрбенк свръхпроводящото цилиндърче е било изготвено чрез електроутаяване на тънък слой олово върху късче медна жичка с диаметър $1{,}3\,.\,10^{-3}$ cm (дълга 1 cm). При температура по-ниска от 3,8 °K оловото се превръща в свръхпроводник, а медта остава нормален метал. Жичката се поставя в слабо регулируемо магнитно поле и температурата се понижава дотогава, докато оловото премине в свръхпроводящо състояние. След това външният източник на полето се премахва. Вие разбирате, че според закона на Ленц това предизвиква появяване на ток, който се стреми да погаси ефекта на намаляване на потока във вътрешността на цилиндърчето. При това в цилиндърчето възниква магнитен момент, пропорционален на потока през него. Този магнитен момент се измерва, като за целта жичката се мести нагоре и надолу (подобно на игла на шевна машина, но с честота 100 пъти в секунда) във вътрешността на две малки бобинки, поместени в краищата на оловното цилиндърче. Мярка за магнитния момент е индуцираното в бобинките напрежение.

След провеждането на опита Дивер и Фейрбенк установяват, че потокът действително се квантува, но *фундаменталната единица е равна на половината от тази, която предсказва Лондон*. Същият резултат получават Дол и Набауер. Първоначално това изглеждало твърде тайнствено[4], но сега е ясно защо се получава така. Съгласно теорията на свръхпроводимостта на Бардин Купер и Шрифер това q, което стои в (19.29) е заряд на двойката електрони, т. е. то е равно на $2q_e$. Фундаменталната единица на потока е равна на

[1] F. London, Superfluids, Vol.1, New York, 1950, p. 152.
[2] B. S. Deaver, Jr., W. M Fairbank, Phys, Rev. Letters, **7**, 43 (1961).
[3] R. Doll, M. Nabauer, Phys. Rev. Letters, **7**, 51 (1961).
[4] Някога Онзагер казвал, че това е възможно (вж. цитираната книга на Лондон), но никой не разбирал защо.

$$\Phi_0 = \frac{\pi h}{q_e} \approx 2{,}7 \cdot 10^{-7}\ \text{Gs} \cdot \text{cm}^2, \tag{19.30}$$

т. е. равна на половината от това, което предсказва Лондон. Сега всичко се съгласува и измерванията свидетелствуват за съществуването на предсказаното чисто квантово, но едромащабно явление.

19-8. Динамика на свръхпроводимостта

Ефектът на Майснер и квантуването на потока потвърждават нашите общи представи. Струва си за пълнота да се покаже как биха изглеждали от тази позиция пълните уравнения на свръхпроводящата течност; получава се нещо много интересно. Досега аз заместих израза на ψ само в уравненията за плътността и заряда. Но ако аз го поставя в уравнението на Шрьодингер, ще получа уравнението за ρ и θ. Интересно е да се види какво ще се получи от това, тъй като пред нас сега има „течност“ на електронни двойки с плътност на заряда ρ и с тайнствената характеристика θ; ние можем да се опитаме да установим как изглеждат уравненията за такава „течност“! И тъй да заместим вълновата функция (19.17) в уравнението на Шрьодингер (19.3) и да си спомним, че ρ и θ са реални функции на x, y и z. Ако отделим реалната част от имагинерната, ще получим две уравнения. С цел да се получи всичко по-кратко, имайки пред вид (19.19), аз ще положа

$$\frac{\hbar}{m}\vec{\nabla}\theta - \frac{q}{m}\mathbf{A} = \mathbf{v}. \tag{19.31}$$

Тогава едното от двете уравнения приема вида

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla}\cdot\rho\mathbf{v}. \tag{19.32}$$

Тъй като $\rho\mathbf{v}$ е просто $\mathbf{J}$ [вж. (19.18)], ние още един път получаваме уравнението на непрекъснатостта. Второто уравнение ни дава изменението на θ:

$$\hbar\frac{\partial\theta}{\partial t} = -\frac{m}{2}\mathbf{v}^2 - q\varphi + \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{\sqrt{\rho}}\nabla^2(\sqrt{\rho})\right\}. \tag{19.33}$$

Тези от вас, които добре са запознати с хидродинамиката (мисля, че те са твърде малко), познават това уравнение като уравнение на движение на електрически заредена течност, ако $\hbar\theta$ се разглежда като „потенциал на скоростите“; но последният член, който трябва да отговаря на енергията на свиването на течността, има твърде странна зависимост от плътността ρ. Във всеки случай това уравнение показва, че скоростта на изменение на величината $\hbar\theta$ се дава от член с кинетичната енергия $(m/2)v^2$ плюс член с потенциалната енергия $q\varphi$, плюс добавъчен член с множител $\hbar^2$, който ние ще наречем „квантовомеханична енергия“. Ние видяхме, че вътре в свръхпроводника електростатичните сили поддържат ρ хомогенно, затова във всички практически приложения този член почти съвсем сигурно може да се пренебрегне при условие, че има само една свръхпроводяща област. Ако между два свръхпроводника има някаква граница (или някакви други причини, за сметка на които ρ може да започне рязко да се изменя), този член може да стане съществен.

За онези от вас, които не са така добре запознати с уравненията на хидродинамиката, аз ще се опитам да препиша (19.33) в такъв вид, който позволява да се види по-ясно физиката. Аз ще използувам (19.31), за да изразя θ чрез $\mathbf{v}$. Намирайки градиента на двете страни на уравнението (19.33) и изразявайки с помощта на (19.31) $\vec{\nabla}\theta$ чрез $\mathbf{A}$ и $\mathbf{v}$, аз ще получа

$$\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t} = \frac{q}{m}\left(-\nabla\varphi - \frac{\partial A}{\partial t}\right) - \mathbf{v}\times(\nabla\times\mathbf{v}) - (\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v} - \nabla\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{\sqrt{\rho}}\nabla^2\sqrt{\rho}\right). \tag{19.34}$$

Какво означава това уравнение? Да си спомним най-напред, че

$$-\nabla\varphi-\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}=\mathbf{E}. \tag{19.35}$$

След това виждаме, че ако вземем ротация от уравнението (19.19), ще получим

$$\nabla\times\mathbf{v}=-\frac{q}{m}\nabla\times\mathbf{A}, \tag{19.36}$$

тъй като ротацията от градиента винаги е равна на нула. Но $\nabla\times\mathbf{A}$ е магнитното поле $\mathbf{B}$, така че двата първи члена могат да се запишат във вида

$$\frac{q}{m}(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B}).$$

На края вие трябва да си изясните, че $\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}$ означава скоростта на изменение на скоростта на течността в *дадена точка*. Ако вие се интересувате от една отделна *частица*, нейното ускорение ще се дава от *пълната* производна на $\mathbf{v}$ (или, както понякога говорят в динамиката на течностите, от „съпътстващото ускорение"), свързана с $\partial\mathbf{v}/\partial t$ чрез формулата [вж. гл. 40, § (2/том II)].

$$\left.\frac{d\mathbf{v}}{dt}\right|_{\text{(съпътстващо)}}=\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}+(\mathbf{v}\cdot\nabla)\,\mathbf{v}. \tag{19.37}$$

В дясната част на (19.34) стои същият член $(\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v}$. Ако го пренесем отляво, (19.34) може да се напише така:

$$m\left.\frac{d\mathbf{v}}{dt}\right|_{\text{(съпътстващо)}}=q(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B})$$
$$-\nabla\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{1}{\sqrt{\rho}}\nabla^2\sqrt{\rho}\right). \tag{19.38}$$

След това от (19.36) следва

$$\nabla\times\mathbf{v}=-\frac{q}{m}\mathbf{B}. \tag{19.39}$$

Това са и уравненията на движение на свръхпроводяща електронна течност. Първото уравнение е просто закона на Нютон за заредена частица в електромагнитно поле. То показва, че ускорението на всяка частица от течността със заряд q се предизвиква от действието на обикновена лоренцова сила $q(\mathbf{E}+\mathbf{v}\times\mathbf{B})$ плюс добавъчна сила, която се изразява във вид на градиент на някакъв тайнствен квантовомеханичен потенциал; тази сила обикновено е малка и става забележима само при допиране на два различни свръхпроводника. Второто уравнение показва, че течността е „идеална" — ротацията има винаги нулева дивергенция (дивергенцията на $\mathbf{B}$ винаги е равна на нула). Това означава, че скоростта може да бъде изразена с помощта на потенциал на скоростите. Обикновено за идеална течност пишат $\nabla\times\mathbf{v}=0$, но за *идеална заредена течност в магнитно* поле това уравнение се превръща в (19.39).

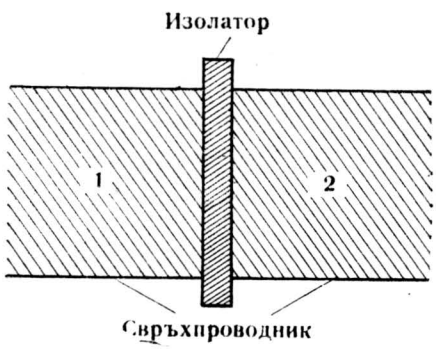
И тъй уравнението на Шрьодингер за електронните двойки в свръхпроводник ни дава уравнението на движение на електрически заредена идеална течност. Теорията на свръхпроводимостта съвпада със задачата на хидродинамиката на заредена течност. Ако вие искате да решите някаква задача, отнасяща се за свръхпроводници, вие вземате тези уравнения за течност или равностойната им двойка уравнения (19.32) и (19.33) и ги съчетавате с уравненията на Максвел, за да получите полетата. (Зарядите и токовете, които вие използувате, за да намерите полетата, трябва естествено да включват както зарядите и токовете в свръхпроводника, така и зарядите и токовете на външните източници).

Впрочем аз считам, че уравнението (19.38) не е съвсем правилно; в него трябва да се добави член с плътност. Той се определя не от квантовата механика, а произтича от обикновената енергия,

свързана с измененията на плътността, тъй както в уравнението за обикновена течност трябва да стои плътността на потенциалната енергия, пропорционална на квадрата на отклонението на ρ от ρ_0 (непертурбираната плътност, която в нашия случай е равна също на плътността на заряда на кристалната решетка). Тъй като трябва да се наблюдават сили, пропорционални на градиента на тази енергия, в (19.38) трябва да има още един член, пропорционален на $\nabla(\rho-\rho_0)$. Такъв член не се появи в нашия анализ, тъй като той възниква благодарение на взаимодействията между частиците, които аз пренебрегнах, приемайки приближението на независимите частици. Но това е същата онази сила, която аз споменах, когато изказах качествено твърдение за това, че електричните сили се стремят да запазят ρ почти неизменно в целия свръхпроводник.

19-9. Преходи на Джозефсън

И ето на края аз преминавам към обсъждане на един много интересен случай, отбелязан за пръв път от Джозефсън[1] при анализ на това, което става при допиране на два свръхпроводника. Нека имаме два свръхпроводника, свързани с помощта на тънък слой изолатор, както е показано на фиг. (19.6). Сега такова устройство се нарича „преход на Джозефсън". Ако изолиращият слой е дебел, електроните не могат да преминават през него, но ако той е достатъчно тънък, електроните могат да имат значителна квантовомеханична амплитуда за преминаване през него. Това е просто нов пример за квантовомеханично преминаване през бариера. Джозефсън прави анализ на такъв случай и изяснява, че при това трябва да имат място редица странни явления.



Фиг. 19.6. Два свръхпроводника, разделени с тънък изолатор

При анализа на такъв контакт аз ще означа с ψ_1 амплитудата за това, че електронът се оказва от едната страна на контакта, а с ψ_2 — амплитудата за това, че той се оказва от другата му страна. В свръхпроводящо състояние вълновата функция ψ_1 е общата вълнова функция за всички електрони от едната страна, а ψ_2 е съответната функция за електроните от другата страна. Тази задача може да се решава за свръхпроводници от различен тип, но ние ще се ограничим с най-простия случай, когато веществото от двете страни е едно и също, така че съединението е от най-прост тип и симетрично. И нека засега няма никакво магнитно поле. Тогава връзката между двете амплитуди трябва да бъде такава:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t}=U_1\psi_1+K\psi_2,$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t}=U_2\psi_2+K\psi_1.$$

Константата K характеризира дадения преход. Ако K би било равно на нула, тази двойка уравнения просто би описвала най-ниското енергетично състояние (с енергия U) на всеки от свръхпроводниците. Но двете страни са свързани с амплитудата K, изразяваща възможността за утечка от едната страна към другата (това е точно известната ни амплитуда на „прехвърляне" в система с две нива). Ако двете страни са еднакви, U_1 ще бъде равно на U_2 и аз имам право да ги извадя. Но сега да предположим, че ние сме свързали двете свръхпроводящи области с двата полюса на батерийка, така че към прехода се оказва приложена потенциална разлика V. Тогава $U_1-U_2=qV$. За удобство аз мога да избера нулата на енергията по средата между U_1 и U_2 и тогава уравненията приемат вида

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi_1}{\partial t}&=\frac{qV}{2}\psi_1+K\psi_2,\\ i\hbar\frac{\partial\psi_2}{\partial t}&=-\frac{qV}{2}\psi_2+K\psi_1, \end{aligned} \tag{19.40}$$

[1] B. D. Josephson, Physics Letters, **1**, 251 (1962).

Това са стандартните уравнения за две свързани квантовомеханични състояния. Нека този път анализираме получените уравнения по друг начин. Да направим субституцията

$$\psi_1=\sqrt{\rho_1}\,e^{i\theta_1},$$
$$\psi_2=\sqrt{\rho_2}\,e^{i\theta_2}, \tag{19.41}$$

където θ_1 и θ_2 са фазите от двете страни на контакта, а ρ_1 и ρ_2 са плътностите на електроните в същите точки. Да си спомним, че ρ_1 и ρ_2 практически съвпадат и са равни на ρ_0 — нормалната плътност на електроните в свръхпроводящия материал. Ако вие сега заместите тези формули за ψ_1 и ψ_2 в (19.40) и приравните реалните части с реалните, а имагинерните с имагинерните, получавате четворката уравнения

$$\dot{\rho}_1=+\frac{2}{\hbar}K\sqrt{\rho_1\rho_2}\sin\delta,$$
$$\dot{\rho}_2=-\frac{2}{\hbar}K\sqrt{\rho_1\rho_2}\sin\delta, \tag{19.42}$$

$$\dot{\theta}_1=+\frac{K}{\hbar}\sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1}}\cos\delta-\frac{qV}{2\hbar},$$
$$\dot{\theta}_2=+\frac{K}{\hbar}\sqrt{\frac{\rho_1}{\rho_2}}\cos\delta+\frac{qV}{2\hbar}, \tag{19.43}$$

където $\delta=\theta_2-\theta_1$.

Първата двойка уравнения показва, че $\dot{\rho}_1=-\dot{\rho}_2$. „Но — ще кажете вие — те нали трябва да бъдат равни на нула, щом ρ_1 и ρ_2 са постоянни и равни на ρ_0". Не съвсем. Тези уравнения не описват всичко. Те показват какви биха били $\dot{\rho}_1$ и $\dot{\rho}_2$ *ако не би имало добавъчни електрични сили* за сметка на небалансираността между електронната течност и фона на положителните йони. Те ни показват как биха започнали да се изменят плътностите и затова описват този ток, който би започнал да тече. Този ток, протичащ от страната *1* към страната *2*, би бил равен именно на $\dot{\rho}_1$ (или на $-\dot{\rho}_2$), т. е.

$$J=\frac{2K}{\hbar}\sqrt{\rho_1\rho_2}\sin\delta. \tag{19.44}$$

Такъв ток бързо би заредил страната *2*, *ако бихме могли да забравим*, че двете страни са свързани с батерия. Обаче той няма да зареди областта 2) и няма да разреди областта 1), защото възникват токове, които изравняват потенциала. Тези токове, създадени от батерията, не влизат в нашите уравнения. Ако ги добавим, ρ_1 и ρ_2 биха оставали фактически поястоянни, а токът през прехода би се определял от формулата (19.44).

Тъй като ρ_1 и ρ_2 наистина остават постоянни и равни на ρ_0, нека да положим $2K\rho_0/\hbar=J_0$ и да напишем

$$J=J_0\sin\delta. \tag{19.45}$$

Тогава J_0 подобно на K е число, характеризиращо дадения преход.

Другата двойка уравнения (19.43) ни дава θ_1 и θ_2. Интересува ни разликата $\delta=\theta_2-\theta_1$, която ние искаме да заместим в (19.45); от уравненията имаме

$$\dot{\delta}=\dot{\theta}_2-\dot{\theta}_1=\frac{qV}{\hbar}. \tag{19.46}$$

Това означава, че можем да напишем

$$\delta(t)=\delta_0+\frac{q}{\hbar}\int V(t)\,dt, \tag{19.47}$$

където δ_0 е стойността на δ при $t=0$. Не забравяйте също, че q е зарядът на двойката, т. е. $q=2q_e$. В уравненията (19.45) и (19.47) се съдържа важен резултат — общата теория на преходите на Джозефсън.

Какво следва от тях? Нека най-напред да приложим постоянно напрежение. Ако се приложи постоянно напрежение V_0, аргумен-

тът на синуса приема вид $\delta_0+(q/\hbar)V_0 t$. Тъй като $\hbar/q$ е малко число (в сравнение с обикновените напрежения и времена), синусът ще се изменя много бързо и в крайна сметка никакъв ток няма да протече. (Тъй като температурата не е равна на нула, практически слаб ток все пак ще протече поради проводимостта на „нормалните“ електрони.) От друга страна, ако напрежението на прехода е равно на *нула*, ток може да протече! Ако няма напрежение, токът може да има каква да е сила между $+J_0$ и $-J_0$ (в зависимост от това, каква е стойността на δ_0). Но опитайте да приложите напрежение и токът ще стане равен на нула. Това странно поведение е било наблюдавано неотдавна експериментално[1].

Ток може да се получи и по друг начин: освен постоянно напрежение да приложим още и високочестотно. Нека

$$V=V_0+v\cos\omega t,$$

където $v\ll V$. Тогава

$$\delta(t)=\delta_0+\frac{q}{\hbar}V_0 t+\frac{q}{\hbar}\frac{v}{\omega}\sin\omega t.$$

Но при малки Δx

$$\sin(x+\Delta x)\approx\sin x+\Delta x\cos x.$$

Разлагайки $\sin\delta$ по това правило, аз получавам

$$J=J_0\left[\sin\left(\delta_0+\frac{q}{\hbar}V_0 t\right)+\frac{q}{\hbar}\frac{v}{\omega}\sin\omega t\cos\left(\delta_0+\frac{q}{\hbar}V_0 t\right)\right].$$

Средната стойност на първия член е равна на нула, но вторият не се обръща в нула, ако

$$\omega=\frac{q}{\hbar}V_0.$$

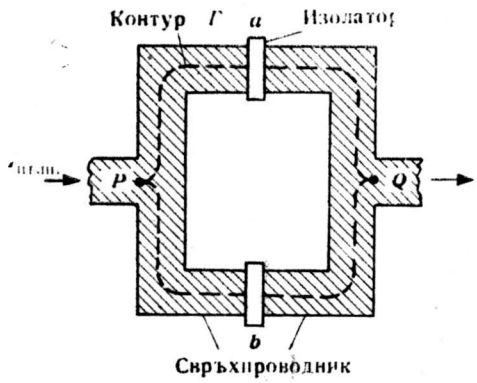
Следователно, ако честотата на променливото напрежение е равна на $(q/\hbar)V_0$, през контакта ще протече ток. Шапиро[1] е наблюдавал експериментално такъв резонансен ефект.

Ако вие прегледате публикациите на тази тема, ще забележите, че в тях формулата за тока често се дава във вида

$$J=J_0\sin\left(\delta_0+\frac{2q_e}{\hbar}\int\mathbf{A}\cdot d\mathbf{s}\right), \qquad (19.48)$$

където интегрирането се провежда по линия, пресичаща прехода. Причината за това е, че ако преходът се намира в полето на векторен потенциал, фазата на амплитудата за преминаване се видоизменя така, както беше обяснено в началото [уравнение (19.1)]. Ако вие навсякъде включите такова фазово отместване, ще получите нужните формули.

На края аз бих искал да опиша един неотдавна проведен ефектен и интересен опит с интерференция на токове, протичащи през два прехода. Ние сме свикнали да се срещаме в квантовата механика с интерференция на амплитуди от два процепа. Сега ще имаме работа с интерференция на два тока, протичащи през два прехода между свръхпроводници. Тя се предизвиква от различието във фазите, с които се сливат токовете, преминали по два различни пътя. На фиг. 19.7 е показано успоредно свързване на два прехода a и b между два свръхпроводника. Краищата на свръхпроводниците P и Q са свързани с приборите, които измерват тока. Външният ток $J_{\text{пълн}}$ е сума на токовете през всеки един от преходите. Нека J_a и J_b са отделните токове през преходите и нека техните фази са δ_a и δ_b. Разликата между фазите на вълновите функции в точките P и Q трябва да бъде еднаква независимо от пътя, по който вие вървите. За пътя, който минава през прехода a, фазовата разлика между P и Q е равна δ_a плюс кри-



Фиг. 19.7. Два успоредни прехода на Джозефсън

[1] P. W. Anderson, J. M. Powell, Phys. Rev. Letters, **10**, 230 (1963).
[2] S. Shapiro, Phys. Rev. Letters, **11**, 80 (1963).

волинейния интеграл от векторния потенциал по горния път, т. е.

$$\Delta\,\text{Фаза}_{P\to Q} = \delta_a + \frac{2q_e}{\hbar}\int_{\substack{\text{Горен}\\ \text{път}}} \mathbf{A}\,.\,d\mathbf{s}. \tag{19.49}$$

Защо? Защото фазата θ е свързана с $\mathbf{A}$ посредством уравнението (19.26). Ако вие интегрирате това уравнение по някаква линия, лявата част ще даде изменението на фазата, което по такъв начин ще се окаже пропорционално именно на получения криволинеен интеграл от $\mathbf{A}$, което сме и написали. Изменението на фазата по долния път се записва аналогично

$$\Delta\,\text{Фаза}_{P\to Q} = \delta_b + \frac{2q_e}{\hbar}\int_{\substack{\text{Долен}\\ \text{път}}} \mathbf{A}\,.\,d\mathbf{s}\,. \tag{19.50}$$

Тези величини трябва да са равни; ако аз ги извадя, ще получа, че разликата между делтите трябва да бъде равна на интеграл от $\mathbf{A}$ по затворения контур Γ, т. е.

$$\delta_b - \delta_a = \frac{2q_e}{\hbar}\oint_{\Gamma} \mathbf{A} - d\mathbf{s}.$$

Контурът Γ (вж. фиг. 19.7) преминава през горния и долния преход. Интегралът от $\mathbf{A}$ е магнитният поток Φ през контура. И тъй, двете делти се отличават с $2q_e/\hbar$, умножено на магнитния поток Φ, който се обхваща от двете части на схемата

$$\delta_b - \delta_a = \frac{2q_e}{\hbar}\,\Phi. \tag{19.51}$$

Изменяйки магнитното поле в схемата, аз мога да контролирам тази фазова разлика. Аз ще я нагласявам така, че да мога да проверя дали ще се прояви интерференция между отделните части на пълния ток, който протича през двата прехода. Пълният ток е равен на сумата на J_a и J_b. За удобство ще положа

$$\delta_a = \delta_0 + \frac{q_e}{\hbar}\,\Phi, \qquad \delta_b = \delta_0 - \frac{q_e}{\hbar}\,\Phi.$$

Тогава

$$J_{\text{пълн}} = J_0\left\{\sin\left(\delta_0 + \frac{q_e}{\hbar}\,\Phi\right) + \sin\left(\delta_0 - \frac{q_e}{\hbar}\,\Phi\right)\right\} =$$

$$= 2J_0 \sin\delta_0 \cos\frac{q_e\Phi}{\hbar}\,. \tag{19.52}$$

Ние не знаем каква е стойността на δ_0 и природата може да ни поднесе всичко, каквото си поиска в зависимост от обстоятелствата. В частност δ_0 може да зависи от приложеното към преходите външно напрежение. Но каквото и да правим, $\sin\delta_0$ не може да се окаже по-голямо от единица. Следователно *максималният* ток за всяко дадено Φ се дава с формулата

$$J_{\text{макс}} = 2J_0\left(\cos\frac{q_e\Phi}{\hbar}\right).$$

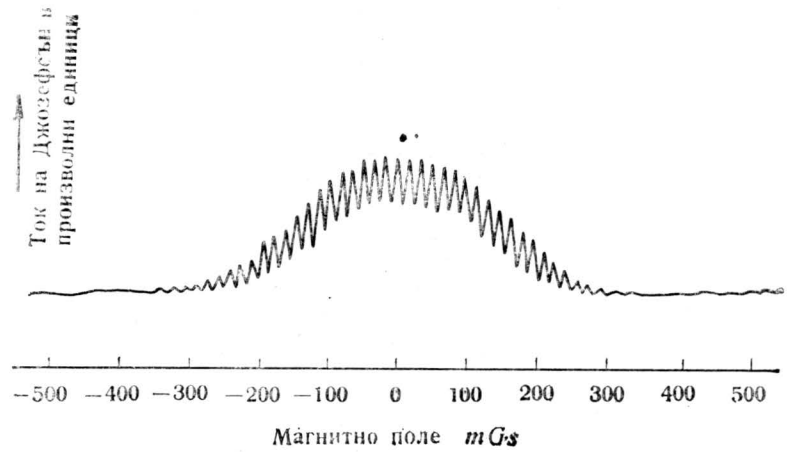
Този граничен ток се изменя в зависимост от Φ и сам достига максимум всеки път, когато

$$\Phi = n\,\frac{\pi\hbar}{q_e},$$

където n е цяло число. С други думи, токът достига своя максимум тогава, когато обхванатият от схемата поток приема същите квантувани стойности (19.30), които ние получихме по-рано.

Токът на Джозефсън през двоен преход е бил измерен неотдавна[1] като функция на магнитното поле в областта между два-

[1] Jaklevic, Lambe, Silver, Mercereau, Phys. Rev. Letters, **12**, 159 (1964).



Фиг. 19.8. Крива на тока през два успоредни прехода на Джозефсън като функция на магнитното поле в областта между двата прехода

та прехода. Резултатът е приведен на фиг. 19.8. Тук ние виждаме общия токов фонд, предизвикан от различни ефекти, които пренебрегнахме, но бързите изменения на тока при изменение на магнитното поле се обясняват с наличието на интерференчния член $\cos(q_e\Phi/\hbar)$ в (19.52).

Един от най-интригуващите въпроси на квантовата механика е въпросът за това, дали съществува векторен потенциал на едно място, където няма поле[1]. Опитът, който току-що описах, е бил направен също тъй и с помощта на малък соленоид, поместен между двата прехода, така че значително магнитно поле B да има само във вътрешността на соленоида, а в областта на преходите то да бъде пренебрежимо малко. Оказва се, че силата на тока се изменя с изменението на потока на магнитното поле във вътрешността на този соленоид, даже и в случая, когато свръхпроводниците остават извън полето. Това доказва още един път „физическата реалност“ на векторния потенциал [вж. гл. 15, §5 (том II)].

Аз не зная какво следва по-нататък. Но да видим какво би могло да се направи. Най-напред забележете, че интерференцията между два прехода може да се използува за конструиране на чувствителен магнитометър. Ако площта, заградена от двата прехода, е равна например на 1 mm^2, максимумите на кривата ще са на разстояние 2.10^{-5} G_s един от друг. Една десета от интервала между максимумите може да се измери просто; следователно с помощта на такова свързване на два прехода е възможно да се измерват полета с големина от порядъка на 2.10^{-6} G_s или да се измерват силни полета със същата висока точност. Може даже да се отиде по-нататък. Да си представим например, че сме поставили близо един до друг на равни разстояния 10—20 прехода. Тогава ще се получи интерференция от 10—20 процепа и при изменение на магнитното поле ние ще получим много резки максимуми и минимуми. Вместо интерференция от два процепа ние ще имаме интерферометър с двадесет, а може би и със сто процепа за измерване на магнитно поле. Вероятно може да се предскаже, че измерванията на магнитните полета с използуването на квантовомеханичната интерференция ще станат почти такива точни, каквито са измерванията на дължините на светлинните вълни.

Описаното явление е още една илюстрация за това, което става във физиката през последните години — появата на транзистора, лазера, а сега на тези преходи между свръхпроводници, практическото значение на които все още не е разкрито напълно. Квантовата механика, открита в 1926 г., имаше вече зад гърба си 40-годишно развитие, когато внезапно тя получи множество реални, практически приложения. Някак си изведнъж се

[1] Jaklevic, Lambe, Silver, Mercereau, Phys. Rev. Letters, **12**,274 (1964).

появява възможност крайно деликатно и тънко да се управлява природата.

За съжаление аз съм длъжен да ви кажа, джентълмени, че за да вземете участие в това, за вас е абсолютно необходимо да изучите квантовата механика колкото може по-бързо. В този курс ние се опитахме да намерим път, по който тайните на тази област от физиката биха станали разбираеми за вас възможно най-рано.

Епилог

Е, какво, аз ви четох лекции две години, време е да свърша. За някои неща аз бих искал да помоля за извинение, а за други — не. Аз се надявам (нещо повече — зная това!), че около двайсет-трийсет души от вас се оказаха в състояние да следят всичко с голяма активност и изпитваха през цялото време удоволствие. Но аз зная и това, че „обучението рядко донася плодове на някои освен на онези, които са предразположени към него, но на тях то им е почти ненужно". Следователно за тези две-три десетки от вас, които разбираха всичко, аз мога да кажа, че разкрих пред тях само истинското положение на нещата. Що се отнася до другите, би било жалко, ако моите лекции са ги заставили да възненавидят предмета. Аз никога преди не съм преподавал елементарна физика и затова много ги моля за извинение. Но все пак аз се надявам, че не ви наплаших твърде много и че вие няма да захвърлите това забележително занимание. Може би някой друг ще ви научи на всичко, което е нужно, без да предизвиква раздразнение и вие в края на краищата ще разберете, че всичко това не е така страшно, както първоначално изглежда.

Осмелявам се да отбележа на края, че аз не съм си поставил за цел да ви подготвя за някакъв изпит и даже за работа в промишлеността или във военното дело. Аз исках повечето от вас да могат да оценят красотата на нашия прекрасен свят и заедно с това да получат физическа представа за света, което, аз мисля, представлява сега главната част от истинската култура на нашата епоха. (Вероятно ще се намерят преподаватели по други дисциплини, които ще се опитат да възразят, но аз си зная, че те са абсолютно неправи.)

А може би вие не само ще съумеете да оцените по достойнство тази култура; не е изключено да поискате сами да се включите в това най-велико дерзание на човешкия разум, издигнал се до такава висота.

Р. Файнман Р. Лейтон М. Сендс

ФАЙНМАНОВИ ЛЕКЦИИ ПО ФИЗИКА

том III

Преводачи *Нъшан Охан Ахабабян*
Дочо Генчев Факиров

Редактор *Александър Донков Донков*
Художник на корицата *Иван Марков*
Художник-редактор *Димитър Чаушов*
Технически редактор *Тинка Стайкова*
Коректор *Тотка Мачорска*
Калиграф *Йорданка Тодорова* и *Ганка Михайлова*

Английска. Издание I. Л. Г. III/20б. Темат. № 3708010230—22/1976 г. Дадена за набор на 17. II. 1975 г. Подписана за печат на 29.IV.1976 г. Излязла от печат на20.IV.1976 г. Формат 60×84/8. Печатни коли 43,50. Изд. коли 40,59. Тираж 7000+108. Поръчка № 9. Подвързия № 7. Цена 2,90 лв.

Държавно издателство „*Народна просвета*“
Държавна печатница „*Васил Александров*“ — *Враца*
София, 1976 г.

Цена 2,90 лв.