

# The physics of vibration

## The simple vibrator in quantum mechanics

A. B. PIPPARD, FRS

Javendish Professor of Physics, University of Cambridge

CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS

Cambridge

London New York New Rochelle

Melbourne Sydney

А.ПИППАРД

# Физика колебаний

## Квантово-механические системы

Перевод с английского  
Д.А.Соболева

Под редакцией  
проф. А.Н.МАТВЕЕВА



Москва  
«Высшая школа»  
1989



ББК 22.31  
П32  
УДК 534

П32

**Пиппард А.**

Физика колебаний. Квантово-механические системы: Пер. с англ. Д. А. Соболева/Под ред. А. Н. Матвеева. Предисл. А. Н. Матвеева. — М.: Высш. шк., 1989. — 263 с.: ил.

Пер. изд.: Pippard A. The Physics of Vibration. The simple Vibrator in quantum Mechanics. Cambridge University Press, 1983.

ISBN 5-06-000059-1

Книга написана известным английским физиком, профессором Кембриджского университета, и представляет собой вторую часть курса «Физика колебаний» (перевод первой части вышел в 1985 г.). В ней рассматриваются в рамках квантовой механики простые колебательные системы и анализируются пределы применимости классического и квазиклассического подходов к квантовым явлениям. Основное внимание уделено физике вибратора в квантовой теории, предельно ясно описаны многочисленные физические явления, к которым могут быть применены результаты теоретического изучения.

П 1604030000(4309000000)—503 109—89  
001(01)—89

ББК 22.31

ISBN 5-06-000059-1 (СССР)  
ISBN 0 521 24623 7 (Великобритания)

© CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS, 1983  
© Д. А. СОБОЛЕВ, перевод на русский язык, 1989  
А. Н. МАТВЕЕВ, предисловие, 1989

## ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА

Предлагаемая вниманию читателей книга известного английского ученого А. Пиппарда является вторым томом его большого труда по физике колебаний. Первый том (М., Высшая школа, 1985) был преимущественно посвящен классическим аспектам проблемы. В нем рассмотрены отдельные квантово-механические задачи, которые поддаются классическому анализу. Во втором томе излагаются квантово-механические вопросы физики колебаний в чисто квантовых явлениях и анализируются пределы применимости классического подхода к этим явлениям. В третьем томе автор предполагает рассмотреть колебания в сложных распределенных системах.

О месте книг А. Пиппарда в обширной литературе по физике колебаний достаточно подробно сказано в предисловии редактора к первому тому. Все отмеченное там сохраняет свое значение и для второго тома, включая высокую оценку научного содержания книги и оригинальности изложения. Подчеркнем еще раз, что, несмотря на наличие многочисленной литературы по физике колебаний, труд А. Пиппарда во многих отношениях уникален и представляет интерес не только для тех, кто изучает физику колебаний, но и для читателей, интересующихся различными областями физики. Это объясняется тем, что очень широкий круг вопросов по своему теоретическому и экспериментальному содержанию сводится к физике колебаний, а в книгах А. Пиппарда дано их оригинальное изложение на разнообразном материале явлений из самых различных областей классической и квантовой физики.

Теория колебаний как в классической, так и в квантовой областях физики основывается на рассмотрении простого вибратора, причем особая роль принадлежит гармоническому осциллятору. В квантовой теории физика гармонического осциллятора лежит в основе понимания теории поля, процедур вторичного квантования и других вопросов. Поэтому квантово-механический подход к изучению простого вибратора имеет даже большее значение, чем классический. Во втором томе основное внимание уделяется самой физике вибратора в квантовой теории, однако при этом не теряются из вида многочисленные физические проблемы, к которым могут быть применены результаты такого изучения.

Другим существенным обстоятельством, обуславливающим важность изучения свойств простого вибратора в квантовой теории, является эффективность их использования для понимания



сути квантовых закономерностей и развития физической интуиции в квантовой области. Поведение квантового осциллятора в сравнении с другими квантовыми системами наиболее полно определяется соответствующими классическими правилами. Поэтому во многих случаях классический подход приводит к результатам, практически совпадающим с квантовыми. В других случаях квазиклассическое приближение позволяет глубоко проникнуть в суть явления, после чего квантовый анализ становится во многих отношениях тривиальным в рамках классической интуиции. Это позволяет сформулировать достаточно четкие критерии пределов применимости квазиклассического подхода к анализу квантовых явлений.

Квазиклассический подход обладает большой эвристической ценностью и эффективностью при анализе действия на вибратор хорошо определенных в классическом смысле сил. Однако, когда речь идет об исследовании взаимодействия вибратора с квантовыми объектами, квазиклассический подход оказывается полностью несостоятельным. Анализ таких ситуаций в книге также уделено много внимания.

При переводе на русский язык по возможности сохранен авторский стиль изложения. Замеченные опечатки исправлены, а примечания к некоторым местам текста имеют терминологический характер.

*Профессор А. Н. Матвеев*

## ПРЕДИСЛОВИЕ

Когда десять лет назад я начал писать книгу о физике колебаний, я думал, что это будет один-единственный том. Четыре года назад я смирился с необходимостью появления двух томов, а сейчас, должен сознаться, из-за сложности предмета сдаю в печать лишь второй из предполагаемых теперь трех томов, не дожидаясь, пока третья часть окажется в одном переплете со второй. Я все еще надеюсь воздать должное колебаниям протяженных систем, однако из-за больших трудностей нас не выручит даже та энергия, с которой в настоящее время разрабатываются некоторые из важнейших вопросов.

Было истинным удовольствием встречать понимание своей работы. Но особенно теплой благодарностью мне хотелось бы отметить помощь, оказанную мне докторами Эдмундом Кроучем и Джоном Хэннеем — много лет тому назад они в качестве студентов-исследователей получили для меня некоторые решения уравнения Шредингера, послужившие надежной отправной точкой моих размышлений; доктором Бобом Бачером, который сопровождал меня в кратких экскурсах в области структурной химии и молекулярной спектроскопии; доктором Эндрю Филлипсом, который посвятил критическому чтению машинописного текста больше времени, чем я смел ожидать. Если машинописный текст в том виде, в котором он был предъявлен в издательство, не имел даже скромного соответствия стандарту, то вина за это ложится исключительно на последствия моих пространных рассуждений и ни в коей мере не относится к миссис Джанет Салборн, терпеливая и преданная работа которой по печатанию рукописи заслуживает большого уважения и, конечно, моей благодарности. Я счастлив сообщить, что оригинал рис. 19.5 любезно предоставлен мне доктором Брайеном Петли. Я по-прежнему очень доволен типографией Кембридж Университи Пресс. Те недосмотры с моей стороны, которые были допущены в первом томе и затрунчали работу с ним, в настоящем томе устранены.

*Кембридж, 1981*

*А. Б. Пиппард*



### 13. КВАНТОВЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ВИБРАТОР И ЕГО КЛАССИЧЕСКИЕ ЧЕРТЫ

Итак, студент, изучающий физику, готов приступить к квантовой механике. По многочисленным примерам он уже знаком с классическим гармоническим вибратором и осведомлен о той решающей роли, которую последний сыграл в развитии идей Планка. Поэтому теперь естественно сосредоточить внимание на математических аспектах уравнения гармонического осциллятора в квантовой механике, на решении уравнения Шредингера, нормировке волновых функций, на вычислении средних значений и матричных элементов, оставив при этом чисто физические вопросы несколько в стороне.

На более высокой ступени рассмотрения гармонический вибратор открывает путь в теорию поля, вторичное квантование и т. д. Обычно такой вибратор используют лишь как инструмент для познания интересных физических явлений, а не рассматривают как физическую колебательную систему. Мы постараемся восстановить равновесие и будем изучать вибратор как «вещь в себе», не теряя из виду все разнообразие физических проблем, к которым можно применить полученные результаты. Правда, таким важным приложениям, как колебания сложных тел и протяженных физических систем, на данном этапе будет уделено мало внимания. Эти вопросы настолько интересны, что заслуживают написания отдельной книги. Колебаниям в сложных телах и протяженных системах будет посвящена третья часть настоящей работы.

Знакомясь с гармоническим вибратором, сразу осознаешь исключительность его природы: ведь он в большей степени, чем какая-либо иная система, подчиняется классическим законам. Просто поразительно, сколько задач, связанных с гармоническими вибраторами, имеют одни и те же решения в классической и в квантовой механике. Мы уделим этому значительное внимание и постараемся достаточно точно (насколько это в принципе возможно) определить границы применимости классического приближения.

В таком рискованном деле всегда существует следующая опасность: вас могут понять так, будто вы вообще пытаетесь обойтись без квантовой механики. Безусловно, жизнь была бы проще, если бы решение любой задачи классическим методом оказывалось верным. Уже в следующей главе приведены примеры задач

с нелинейными вибраторами, которые могут быть решены без особых затруднений классическими методами. Однако эти решения оказываются громоздкими. В квантовой же формулировке подобные задачи решать значительно проще. Более того, классические решения остаются не совсем верными, а иногда и просто ошибочными. Поэтому, как бы ни ценились классические представления, они никогда не могут рассматриваться в качестве полноценной альтернативы квантовых. Достаточно вспомнить еще раз Планка, чтобы признать, что именно классические черты гармонического вибратора, наиболее близкого к классическим системам, положили начало квантовой революции в физике.

Существует и другая сторона медали. Если бы для качественного понимания процесса переноса заряда в металлах и полупроводниках на каждом этапе было необходимо решать уравнение Шредингера, то физика твердого тела в настоящее время не достигла бы столь высокого развития. Именно из классических представлений различных процессов возник фундамент для подробного квантово-механического анализа. Только изучение классических соотношений делает доступными классические представления и дает возможность определять границы их применимости. Так или иначе, чтобы избежать нападков на современную физику, изложение в книге начинается с традиционного подхода к квантовому осциллятору — с формального решения в общих чертах уравнения Шредингера, но не более чем в общих чертах, поскольку подробности можно найти в многочисленных учебниках по квантовой механике [1, 2]. Полученные при этом элементарные результаты пригодятся для дальнейшего анализа.

Следует еще раз отметить, что квантовые вопросы мы будем рассматривать на элементарном уровне, базирующемся на непосредственном решении уравнения Шредингера. Эта книга представляет собой не учебник по квантовой механике, а исследование реальных физических вибраторов. Поэтому нет смысла использовать в ней изощренные математические методы — ведь они либо были созданы просто из любви к искусству, либо разработаны для детального решения чисто квантово-механических проблем, слабо связанных с классическими представлениями или не связанных с ними вовсе.

Все же нетрадиционное обсуждение элементарных вещей, вероятно, окажется полезным даже для читателя, владеющего самыми современными методами.

В качестве примера изложенного подхода можно упомянуть теорию диссипативных процессов, таких, как излучение электромагнитной энергии заряженным гармоническим вибратором. Ниже будет показано, что к этой задаче может быть применена классическая теория связанных вибраторов. Причем применена так, что она дает достоверное объяснение чисто квантовых процессов спонтанных и вынужденных переходов, которые обычно представляются загадочными.



Поскольку в этой главе сделан акцент на классические процессы, следует отметить ценность классических рассуждений в тех случаях, когда они приводят к правильному результату. Последующие три главы также посвящены классическим методам. Но там они приводят к иному результату. Существует лишь несколько стандартных случаев, когда уравнение Шредингера поддается полному аналитическому решению и это решение оказывается полезным, — это задачи о гармоническом осцилляторе, об атоме водорода, о прямоугольной потенциальной яме. Гораздо чаще встречаются такие задачи, при решении которых приходится использовать непростые разложения в ряд или сталкиваться с такими трудностями, что получаемые результаты явно не оправдывают затрачиваемые средства. В подобных задачах, в том числе и в задаче об ангармоническом вибраторе, довольно хорошее приближение к точному решению (см. § 14.2) нередко можно получить с помощью полуклассического подхода, связанного с именами Бора, Вильсона и Зоммерфельда. Этот подход представляет собой в основном полуклассическую процедуру, дополненную правилами квантования, которые позволяют выделять приемлемые решения из большого числа классических решений.

Промежуточное положение между непосредственным решением уравнения Шредингера и полуклассическим подходом занимает приближенный метод Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна — Джеффри (см. § 14.3). В следующей главе приведены примеры применения этих методов к нескольким ангармоническим вибраторам, рассмотрение которых точными методами сопряжено с большими трудностями. Здесь явно раскрываются преимущества приближенных методов.

Третьему приложению классических вибраторов посвящена гл. 17. Реальная физическая система заменяется в ней совершенно иной классической системой, поведение которой позволяет смоделировать отдельные черты квантового поведения первой. В частности, функция отклика на импульс для квантовой системы (например, для атома) может быть смоделирована в линейном приближении с помощью набора классических гармонических осцилляторов. Следовательно, по известному отклику гармонического осциллятора на это воздействие можно определить отклик на воздействие любой силы, слабо зависящей от времени. Возможность создания подобных моделей позволяет рассчитывать на успех классической интерпретации аномальной дисперсии. Моделирование также оправдывает классическое рассмотрение ядерного магнитного резонанса.

Остальная часть этого тома посвящена связи квантовых переходов с классическим гармоническим вибратором. При этом постоянно уделяется внимание тем вопросам, которые имеют отношение к реальным физическим колебательным системам. Две последние главы посвящены рассмотрению мазеров, лазеров (хотя и очень кратко), процессов группировки, устанавливающих умо-

зрительную связь между лазерами и некоторыми генераторами незатухающих колебаний. Среди них для подробного обсуждения выбран клистрон. Чтобы заняться этими вопросами, необходимо рассмотреть взаимодействие излучения с квантовыми системами с различных позиций. В гл. 20 (см. § 20.6) приведена довольно точная картина излучательного перехода с затуханием, которому достаточно хорошо соответствует примитивная модель гармонического вибратора с вязким затуханием (заметим, что этот переход является истинным источником квантового шума).

При чтении этой книги часто возникает вопрос: если классические методы столь хороши для описания различных аспектов поведения гармонических вибраторов, то в чем же суть характерных особенностей квантового подхода? Ответ таков: классическое приближение, сколь бы успешным оно ни оказывалось при описании вибраторов, находящихся под действием вполне определенных сил, непригодно в том случае, когда сама сила возникает в системе, которую следует рассматривать как квантовую. Понять это — значит заручиться критериями для оперативного решения вопроса о применимости классических методов.

### 13.1. РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Частица массы  $m$ , движущаяся вдоль некоторой линии под действием линейной возвращающей силы, обладает потенциальной энергией

$$V = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2$$

( $\omega_0$  — классическая угловая частота колебаний). Поведение частицы определяется не зависящим от времени уравнением Шредингера

$$[\hbar^2/(2m)] d^2\psi/dx^2 + (E - \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2) \psi = 0. \quad (13.1)$$

Почти везде в дальнейшем будет использоваться иная форма записи этого уравнения:

$$d^2\psi/d\xi^2 + (\epsilon - \xi^2) \psi = 0, \quad (13.2)$$

где введены новые переменные

$$\xi = (m\omega_0/\hbar)^{1/2} x \text{ и } \epsilon = 2E/(\hbar\omega_0).$$

Заметим, что кванту энергии  $\hbar\omega_0$  соответствует значение  $\epsilon = 2$ , а мера длины  $[\hbar/(m\omega_0)]^{1/2}$  представляет собой амплитуду соответствующего классического осциллятора, когда его энергия равна единице, или  $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$  лабораторных единиц.

Можно взять произвольное значение  $\epsilon$ , одновременно выбрав величины  $\psi$  и  $\psi'$  для некоторого  $\xi$ , а затем приступить к последовательному интегрированию уравнения (13.2). Результирующее решение, разумеется, будет быстро расходиться как при положи-



тельных, так и при отрицательных  $\xi$ . Оно не может рассматриваться как имеющее физический смысл. Однако независимо от того, расходится это решение или нет, оно может быть использовано для получения другого, в равной мере хорошего, решения для того же значения  $\epsilon$  с помощью простого отражения относительно начала координат. Поскольку  $\xi$  входит в уравнение (13.2) только во второй степени, в случае если  $\psi(\xi)$  является решением уравнения,  $\psi(-\xi)$  также будет его решением.

Так как уравнение (13.2) линейно, все решения могут быть представлены в симметричной или несимметричной форме в виде суперпозиции  $\psi(\xi) \pm \psi(-\xi)$ . Для того чтобы в результате интегрирования получить определенную форму решения, следует брать не любые значения  $\psi$  и  $\psi'$ , а выбирать их определенным образом. Для симметричного решения следует принять  $\psi'(0) = 0$ , а  $\psi(0) \neq 0$ . Для несимметричного решения, наоборот,  $\psi(0) = 0$ , а  $\psi'(0) \neq 0$ . Для произвольного  $\epsilon$  существуют одно симметричное и одно несимметричное решения. В общем случае они расходятся при больших  $|\xi|$ , ибо, когда  $\xi^2 > \epsilon$ ,  $\psi''$  имеет тот же знак, что и  $\psi$ . Начиная с этой точки расходимость неизбежна, поскольку, если в процессе интегрирования  $\psi'$  окажется одного знака с  $\psi$ , кривая будет монотонно удаляться от оси, так как знак  $\psi'$  никогда не сможет измениться на обратный.

С другой стороны, если кривая устремится к оси, когда  $\psi$  и  $\psi'$  имеют противоположные знаки, ее наклон может убывать не так быстро, чтобы предотвратить пересечение с осью. Как только оно произойдет, расходимость окажется неизбежной, поскольку знаки  $\psi$  и  $\psi'$  теперь окажутся одинаковыми. Сходимость к нулю при больших значениях  $\xi$  может достигаться только при определенном выборе  $\epsilon$ , а именно при таком, когда кривая приближается к оси под малым углом.

При очень больших  $\xi$  значение  $\epsilon$  почти не играет роли, и при соответствующем его выборе можно обеспечить асимптотическое поведение. Поэтому, когда  $\epsilon = 1$ , одним из двух независимых решений уравнения (13.2) оказывается функция  $e^{-1/2\xi^2}$ . Когда же  $\epsilon = -1$ , одним из решений является  $e^{1/2\xi^2}$ . Оба решения очень близки к решениям при других значениях  $\epsilon$ . С ростом  $\xi$  решение для любого  $\epsilon$  приближается к линейной комбинации

$$\psi \sim Ae^{1/2\xi^2} + Be^{-1/2\xi^2}.$$

Только при соответствующем выборе  $\epsilon$  симметричное и несимметричное решения для малых  $\xi$  могут плавно переходить в асимптотическую форму, содержащую только  $R$ , тем самым устремляясь к нулю, что и требовалось. Это служит объяснением дальнейшего представления решения уравнения (13.2) в виде произведения  $e^{-1/2\xi^2}$  на разложение  $\xi$  в степенной ряд. Подробности хорошо описаны в самых распространенных учебниках, а здесь необходимо отметить лишь то, что результирующий степенной ряд

вообще расходится почти как  $e^{\xi^2}$ . В общем случае это доказывает, что в асимптотическом виде  $A \neq 0$ .

Однако при определенном выборе  $\epsilon$  ряд может заканчиваться так, что  $\psi$  будет представлять собой произведение  $e^{-1/2\xi^2}$  на ограниченный полином  $H_n(\xi)$ , который не может возрастать при больших  $\xi$  столь быстро, чтобы преобладать над экспоненциальным множителем. Требуемые значения  $\epsilon$  составляют  $2n+1$ . Как и предполагал Планк, они соответствуют значениям  $E = (n+1/2)\hbar\omega_0$ , за исключением  $1/2\hbar\omega_0$ . Тогда получаем подходящее решение:

$$\psi_n = N_n H_n(\xi) e^{-1/2\xi^2}, \quad (13.3)$$

где

$$N'_n = \pi^{-1/4} (2^n n!)^{-1/2} \quad (13.4)$$

— нормировочные коэффициенты, обеспечивающие выполнение условия

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^2 d\xi = 1;$$

$H_n$  — полиномы Эрмита, представляющие собой примеры волновых функций низших порядков [3]:

$$\begin{cases} n=0; \psi_0 = 0,75113(1) e^{-1/2\xi^2}; \\ n=1; \psi_1 = 0,53113(2\xi) e^{-1/2\xi^2}; \\ n=2; \psi_2 = 0,26556(4\xi^2 - 2) e^{-1/2\xi^2}; \\ n=3; \psi_3 = 0,10842(8\xi^3 - 12\xi) e^{-1/2\xi^2}; \\ \dots \\ n=10; \psi_{10} = 1,2321 \cdot 10^{-5} (1024\xi^{10} - 23040\xi^8 + \\ + 161280\xi^6 - 403200\xi^4 + 302400\xi^2 - 30240) e^{-1/2\xi^2}. \end{cases} \quad (13.5)$$

Полиномы Эрмита связаны между собой соотношением

$$H_{n+s} = 2\xi H_n - 2n H_{n-1}. \quad (13.6)$$

Из этого соотношения легко получить последующие полиномы, а значит, и сколь угодно длинную последовательность  $\psi_n$ . Эти примеры показывают чередование симметричных (четные степени  $\xi$ ) и несимметричных (нечетные степени  $\xi$ ) волновых функций.

Вид некоторых волновых функций и функции  $\psi\psi^*$  показан на рис. 13.1. Поскольку  $\psi$  — нормированная функция, величина  $\psi\psi^* d\xi$  представляет собой вероятность нахождения осциллирующей частицы в интервале  $d\xi$ . Для классического осциллятора она равна  $d\xi / [\pi(\xi_0^2 - \xi^2)^{1/2}]$  и имеет явно выраженные максимумы на краях интервала  $\pm\xi_0$ . Огибающая функции  $\psi\psi^*$  приближается к ней при больших  $n$ . Однако в самых низких состояниях нет ни малейших признаков подобного поведения. В частности, распределение вероятности для основного состояния сохраняет определенную ши-



рину, сравнимую с соответствующей величиной для классического осциллятора с энергией  $\frac{1}{2}\hbar\omega_0$  — нулевым значением энергии квантовой системы.

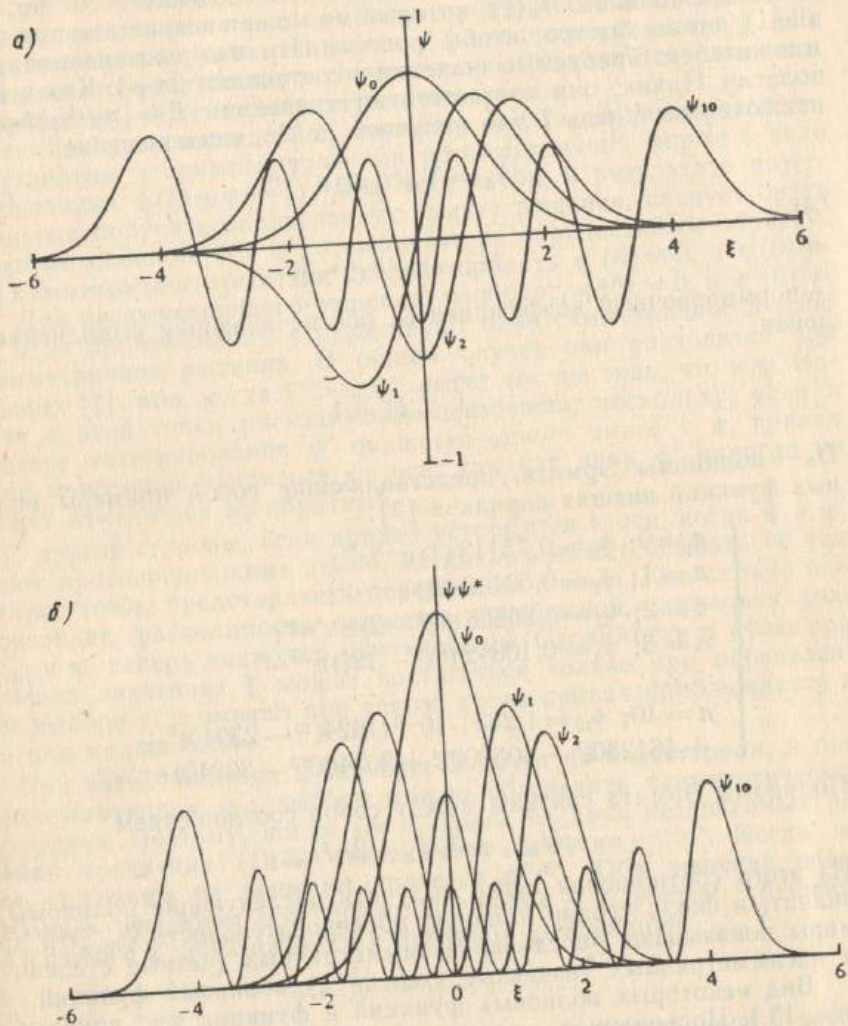


Рис. 13.1. Волновые функции гармонического осциллятора (а) для стационарных состояний  $\psi_0, \psi_1, \psi_2$  и  $\psi_{10}$  (определяются системой уравнений (13.5)). Вид  $\psi\psi^*$  для тех же волновых функций (б)

Когда  $n$  велико, максимум становится острее, что следует из уравнения (13.2) в окрестности классического предела  $\xi^2 = \varepsilon$ . Замена  $\xi$  на  $\varepsilon^{1/2} + z/(2^{1/3}\varepsilon^{1/6})$  и пренебрегая членами второго по-

рядка по  $z$ , получим, что уравнение (13.2) преобразуется в уравнение Эйри:

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} - z\psi = 0. \quad (13.7)$$

Это эквивалентно представлению параболической кривой  $V$  в виде прямой линии в непосредственной близости от классического предела. Безразмерная форма уравнения (13.7) указывает на то, что в  $z$ -координатах расстояние между крайними максимумами всегда остается неизменным. Следовательно, в  $\xi$ -координатах или в лабораторных  $x$ -координатах это расстояние меняется не очень сильно — как  $\varepsilon^{1/6}$ . Однако эта зависимость становится существенной при больших значениях квантового числа —  $\sim 10^6$  и более. Именно с такими значениями придется иметь дело при обсуждении мазеров.

Из приведенных выше рассуждений следует также, что хвост волновой функции за классическим пределом сужается с ростом  $n$ . Из таблиц функции Эйри [4] находим, что последний максимум  $\psi\psi^*$  имеет место при  $z = -1,019$ , а значение  $\psi\psi^*$  уменьшается в  $e$  раз сразу за классическим пределом при  $z = 0,116$ . Выбирая  $\Delta z \cdot 1,135$  в качестве меры ширины хвоста, получаем  $\Delta\xi_n = 0,80/n^{1/2}$ , что составляет 0,08 при  $n = 10^6$ . Это можно сравнить с шириной  $\Delta\xi_0 = 1$ , соответствующей уменьшению  $\psi_0\psi_0^*$  в  $e$  раз по сравнению с максимальным значением.

### 13.2. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МОМЕНТОВ

Другим подходом является представление волновой функции в качестве суперпозиции бегущих волн:

$$\psi_n(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(\kappa) e^{i\kappa\xi} d\kappa. \quad (13.8)$$

Здесь  $\phi_n \phi_n^* dk$  представляет собой вероятность нахождения движущейся частицы с волновым числом в интервале  $dk$ . Поскольку  $p \sim k$ , произведение  $\phi_n \phi_n^*$  описывает вероятность распределения импульса  $p$ . Используя Фурье-разложение, получаем

$$\varphi_n(\kappa) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(\xi) e^{-i\kappa\xi} d\xi. \quad (13.9)$$

Теперь можно продемонстрировать одну из специфических особенностей гармонического осциллятора. Она состоит в том, что дифференциальное уравнение, которому подчиняется  $\Phi_n$ , имеет такой же вид, как и уравнение для  $\psi_n$ . Умножая почленно уравнение (13.2) на  $e^{-ik\xi}$  и интегрируя по  $\xi$ , с использованием результатов,



полученных при дифференцировании подынтегральных выражений в соотношениях (13.8) и (13.9), имеем

$$d^2\psi_n/d\xi^2 = - \int_{-\infty}^{\infty} \kappa^2 \varphi_n e^{i\kappa\xi} d\kappa.$$

Поэтому

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\kappa\xi} (d^2\psi_n/d\xi^2) d\xi = -2\pi\kappa^2\varphi_n$$

и

$$\int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \psi_n e^{-i\kappa\xi} d\xi = -2\pi d^2\varphi_n/d\kappa^2.$$

Следовательно, из уравнения (13.2) найдем

$$d^2\varphi_n/d\kappa^2 + (\varepsilon_n - \kappa^2)\varphi_n = 0. \quad (13.10)$$

Уравнение (13.10) является таким же, как и уравнение (13.2). Это позволяет заключить, что кривые, приведенные на рис. 13.1, также описывают и распределение импульса. Аналогично, для классического вибратора распределения координаты и импульса при определенном выборе масштаба хорошо совпадают друг с другом. Выбранные выше переменные обеспечивают хорошее совпадение.

Следует отметить, что, поскольку очевидным является равенство  $\langle \xi^2 \rangle = \langle \kappa^2 \rangle$ , средние значения кинетической и потенциальной энергии совпадают. Аналогично, так как  $\xi = (m\omega_0/\hbar)^{1/2}x$ , то  $\kappa = [\hbar/(m\omega_0)]^{1/2}k$ . Здесь  $k$  — обычное волновое число и

$$\left. \begin{aligned} \langle T \rangle &= [\hbar^2/(2m)] \langle \kappa^2 \rangle = 1/2 \hbar \omega_0 \langle \kappa^2 \rangle, \\ \langle V \rangle &= 1/2 m \omega_0^2 \langle x^2 \rangle = 1/2 \hbar \omega_0 \langle \xi^2 \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (13.11)$$

тогда как

$$\langle V \rangle = 1/2 m \omega_0^2 \langle x^2 \rangle = 1/2 \hbar \omega_0 \langle \xi^2 \rangle.$$

Равенство средних значений кинетической и потенциальной энергии — это тоже классическое свойство. Ниже будет показано, что оно остается неизменным даже когда осциллятор находится в нестационарном состоянии. Однако для доказательства этого нестационарное состояние придется представить как суперпозицию стационарных.

### 13.3. НЕСТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ

Волновые функции стационарных состояний  $\psi_n$  являются пространственными частями решений не зависящего от времени уравнения Шредингера, которое в одномерном случае имеет вид

$$\frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - V\Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (13.12)$$

Когда  $V = 1/2 m \omega_0^2 x^2$ , для гармонического вибратора в приведенных переменных можно записать

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi^2} - \xi^2 \Psi = -2i \frac{\partial \Psi}{\partial \tau}. \quad (13.13)$$

Здесь, как и раньше,  $\xi = (m\omega_0/\hbar)^{1/2}x$ , а  $\tau = \omega_0 t$ . Общее выражение волновой функции  $\Psi_n$  для  $n$ -го стационарного состояния имеет вид

$$\psi_n e^{-i(n+1/2)\tau},$$

где  $\psi_n$  удовлетворяют уравнению (13.2), если  $\varepsilon = 2n+1$ . Поскольку уравнение (13.13) является линейным относительно  $\Psi$ , произвольная линейная комбинация различных  $\Psi_n$  также является его решением:

$$\Psi = \sum_n a_n \Psi_n = e^{-i\tau/2} \sum_n a_n \psi_n e^{-in\tau}. \quad (13.14)$$

Когда  $\Psi$  и все  $\psi_n$  нормированы на единицу (а это общепринято), то вследствие ортогональности  $\psi_n$

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi \Psi^* d\xi = \sum_n \sum_m a_n a_m^* \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \psi_m^* d\xi = \sum_n a_n a_n^*. \quad (13.15)$$

В экспериментальных исследованиях\* величину  $a_n a_n^*$  можно интерпретировать как вероятность нахождения системы в  $n$ -м состоянии. Если попытаться определить энергию системы, то среднее значение  $\langle E \rangle$  для большого числа повторных измерений составит  $\sum a_n a_n^* E_n$  — взвешенное усредненное значение энергии уровней по вероятности заполнения.

До тех пор, пока система не подвергается возмущениям и  $V$  не зависит от времени,  $\Psi$  сохраняет вид (13.14) с постоянными значениями  $a_n$ . Представив  $\Psi$  для любого момента времени в виде суммы  $\psi_n$ , можно однозначно определить все последующее поведение функции  $\Psi$ . Более того, функции  $\psi_n$ , полученные в результате нахождения всех стационарных решений не зависящего от времени уравнения Шредингера с произвольной выбранной зависимостью  $V$  от положения, образуют полную систему ортогональных функций. Она может быть использована для Фурье-представления любой другой функции с не слишком «патологическим» поведением. Следовательно, если функция  $\Psi$  известна в любой момент времени, то для нахождения ее значений в последующие моменты  $\Psi$  следует представить в виде суммы  $\sum_n a_n \psi_n$ , а затем

дополнить каждое значение  $\psi_n$  соответствующим временным изменением, как в выражении (13.14).

\* Например, в таком эксперименте, как опыт Штерна и Герлаха, где атомы, находящиеся в различных состояниях, разделены в пространстве неоднородным магнитным полем. Придумать соответствующий эксперимент для гармонического вибратора очень не просто.



### 13.4. КОГЕРЕНТНОЕ СОСТОЯНИЕ

В качестве примера рассмотрим функцию

$$\Psi = \pi^{-1/4} e^{-1/2((\xi - b \cos \tau)^2 - i\Theta(\xi, \tau))}. \quad (13.16)$$

Здесь  $b$  — действительная постоянная, а

$$\Theta = 1/2 \tau + b \xi \sin \tau - 1/4 b^2 \sin 2\tau. \quad (13.17)$$

Легко проверить, что функция (13.16) является нормированным решением уравнения (13.13). Фаза  $\Theta$ , разумеется, не входит в распределение вероятности:

$$\mathcal{P}(\xi) = \Psi \Psi^* = \pi^{-1/2} e^{-(\xi - b \cos \tau)^2}. \quad (13.18)$$

Волновая функция (13.16) представляет собой нерасплывающийся гауссовский волновой пакет, осциллирующий с амплитудой  $b$ . Он соответствует когерентному состоянию и имеет для нас особый интерес, поскольку функция  $\Psi$  принимает именно такой вид, если к вибратору, первоначально находящемуся в своем основном состоянии, приложить однородную, изменяющуюся во времени силу. Это будет показано в соответствующем месте настоящей книги. Пока что отметим некоторые характерные черты функции  $\Psi$ , используя разложение по стационарным компонентам в момент времени  $\tau=0$ , когда  $\Theta=0$  и пространственная часть функции  $\Psi$  равна  $\pi^{-1/4} e^{-1/2(\xi - b)^2}$ . Если

$$\pi^{-1/4} e^{-1/2(\xi - b)^2} \sum_n a_n \phi_n,$$

то, умножая (13.3) и (13.4) на  $\phi_n$  и интегрируя их, можно найти

$$\begin{aligned} a_n &= \int_{-\infty}^{\infty} \pi^{-1/4} e^{-1/2(\xi - b)^2} \phi_n d\xi = \\ &= (2^n \pi n!)^{-1/2} e^{-1/2 b^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) e^{\xi^2 - (\xi - 1/2 b)^2} d\xi. \end{aligned} \quad (13.19)$$

Перестановка экспоненциального сомножителя в последнем интеграле позволяет использовать тождество, справедливое для полиномов Эрмита:

$$e^{-\xi^2 - (\xi - \eta)^2} = \sum_l H_l(\xi) \eta^l / l! \quad (13.20)$$

Тогда, учитывая ортогональность функций  $\phi_n$ , интеграл (13.19) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n e^{\xi^2 - (\xi - 1/2 b)^2} d\xi &= \frac{\sum_l \left(\frac{1}{2} b\right)^l}{l!} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n H_l d\xi = \\ &= \frac{\sum_l \left(\frac{1}{2} b\right)^l}{l!} \int_{-\infty}^{\infty} [\phi_n \phi_l / (N_n' N_l')] d\xi = \left(\frac{1}{2} b\right)^n / (N_n'^2 n!). \end{aligned}$$

Следовательно,

$$a_n = b^n e^{-1/2 b^2} / (2^n n!)^{1/2}. \quad (13.21)$$

и из уравнения (13.14) получаем выражение для  $\Psi(\xi, \tau)$  в общем виде:

$$\Psi(\xi, \tau) = e^{-1/2 b^2 - 1/2 i \tau} \sum_n [b^n / (2^n n!)^{1/2}] \phi_n e^{-i n \tau}. \quad (13.22)$$

Легко проверить, что условие нормировки (13.15) удовлетворяется:

$$\sum_n a_n a_n^* = e^{-1/2 b^2} \sum_n \left(\frac{1}{2} b^2\right)^n / n!$$

Сумма в правой части в точности представляет собой разложение в степенной ряд функции  $e^{1/2 b^2}$ . Следовательно,

$$\sum_n a_n a_n^* = 1.$$

Классический осциллятор, амплитуда  $\xi$  которого равна  $b$ , обладает энергией  $1/2 b^2 (\hbar \omega_0)$ . Если обозначить  $1/2 b^2$  как  $n_c$ , то последнюю величину можно истолковать как количество квантов, необходимых для обеспечения энергией соответствующего классического осциллятора. Вероятность нахождения квантового осциллятора в  $n$ -м состоянии с  $n$  квантами в дополнение к нулевой энергии составляет  $a_n a_n^*$  или  $n_c^n e^{-n_c} / n!$ . Тогда среднее число квантов составит

$$\langle n \rangle = e^{-n_c} \sum_n n n_c^n / n! = n_c.$$

При больших  $n_c$  хорошее приближение к  $a_n a_n^*$  можно получить, если воспользоваться формулой Стирлинга:

$$\ln n! \sim n \ln n - n.$$

Далее, если обозначить  $n - n_c$  через  $x$ , то

$$\ln(a_n a_n^*) \sim -(n_c + x) \ln(1 + x/n_c) + x$$

и искомое приближение можно получить, представив  $\ln(1 + x/n_c)$  в виде  $x/n_c - x^2/(2n_c^2)$ . В этом случае

$$a_n a_n^* \sim e^{-(n - n_c)^2 / (2n_c)}. \quad (13.23)$$

Полностью заполненные энергетические уровни расположены вблизи  $n_c^{1/2}$ , т. е. значительно ниже значения  $n_c$ , соответствующего сильно возбужденному состоянию осциллятора. Энергия осциллятора в этом нестационарном состоянии не зависит от характера движения и принимает то же самое значение, которым обладает классическая частица, движущаяся в центре инерции волнового пакета. Это значение отличается на половину энергии кванта от энергии нулевого уровня и может оказаться именно той величи-



ной, которая необходима для удержания частицы внутри волнового пакета. Действительно, как видно из системы (13.5), функция  $\pi^{-1/4} e^{-1/2 \xi^2}$  в точности совпадает с волновой функцией основного состояния.

Можно провести еще одну параллель с классическим решением, а именно: энергия возбуждения (т. е.  $E - 1/2 \hbar \omega_0$ ) периодически преобразуется из потенциальной в кинетическую, и среднее отклонение  $\langle \xi \rangle$  осциллирует, как в случае простого гармонического движения. Эти два вывода свойственны не только рассмотренному здесь частному решению. Как будет показано, они являются в общем случае общими и вытекают из специального вида структуры (пространственно однородной) энергетических уровней и волновых функций, который не может быть реализован для других физических систем.

### 13.5. ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ И КИНЕТИЧЕСКАЯ ЭНЕРГИИ

Для того чтобы показать перераспределение энергии, рассмотрим волновую функцию в момент времени  $\tau_0$ , представив ее в виде Фурье-суммы:

$$\Psi(\xi, \tau_0) = \sum_n a_n \psi_n.$$

Спустя четверть периода в момент времени  $\tau_0 + 1/2 \pi$  каждая компонента изменится в  $e^{-1/2 i n \pi}$  раз. Поэтому

$$\Psi(\xi, \tau_0 + \frac{1}{2} \pi) = \sum_n (-i)^n a_n \psi_n.$$

Потенциальная энергия в преобразованных переменных равна  $\langle \xi^2 \rangle$ . Следовательно,

$$V(\tau_0) = \sum_m \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} a_m^* \psi_m \xi^2 a_n \psi_n d\xi.$$

Аналогично,

$$V(\tau_0 + \frac{1}{2} \pi) = \sum_m \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} (-i)^{n-m} a_m^* \psi_m \xi^2 a_n \psi_n d\xi.$$

Теперь из всех величин в этих двойных суммах (вследствие симметрии при чередовании четных и нечетных  $\psi_n$ ) ненулевыми оказываются только те, для которых  $n - m$  четно. С другой стороны, не обращаются в нуль лишь те интегралы, для которых  $n - m = 0$  или  $\pm 2$ , т. е.

$$M_{n, n-2}^{(2)} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \xi^2 \psi_{n-2} d\xi = \frac{1}{2} [n(n-1)]^{1/2}$$

и

$$M_{n, n}^{(2)} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \xi^2 \psi_n d\xi = n + \frac{1}{2}. \quad (13.24)$$

Следовательно,

$$V(\tau_0) = \sum_n \left\{ a_n a_n^* \left( n + \frac{1}{2} \right) + 2 \operatorname{Re} [a_n^* a_{n-2}] M_{n, n-2}^{(2)} \right\},$$

тогда как

$$V(\tau_0 + \frac{1}{2} \pi) = \sum_n \left\{ a_n a_n^* \left( n + \frac{1}{2} \right) - 2 \operatorname{Re} [a_n^* a_{n-2}] M_{n, n-2}^{(2)} \right\}.$$

Теперь полная энергия  $\varepsilon$  равна  $\sum_n a_n a_n^* (2n+1)$ , что ровно в два раза больше первоначального значения. Из этого немедленно следует

$$V(\tau_0 + \frac{1}{2} \pi) = \varepsilon - V(\tau_0) = T(\tau_0), \quad (13.25)$$

где  $T(\tau_0)$  — кинетическая энергия в момент времени  $\tau_0$ . Каждые четверть периода распределение энергии между потенциальной и кинетической оказывается одним и тем же. Можно также отметить, что  $\Psi(\xi) \neq \Psi(-\xi)$  каждые полпериода.

То же самое справедливо и для классического гармонического вибратора. Но есть одно существенное отличие. Для классического вибратора можно выбрать такой момент  $\tau_0$ , что вся его энергия окажется либо полностью кинетической, либо полностью потенциальной. В течение каждого периода имеет место полный переход энергии из одного вида в другой и обратно.

С другой стороны, у квантового вибратора не существует таких состояний, когда или кинетическая, или потенциальная энергия полностью отсутствует. Таким образом, функция (13.6) в момент времени  $\tau = 0$  принимает вид  $\pi^{-1/4} e^{-\frac{1}{2}(\xi-b)^2}$ , для которого

смещение становится наибольшим;  $V$  имеет максимальное значение, равное  $b^2$ , а  $T$  — минимальное, равное  $1/2$ . Нулевое значение кинетической энергии соответствует фазовой постоянной гауссовского волнового пакета. Спустя четверть периода  $\Psi$  представляет собой смещенный волновой пакет;  $V$  достигает минимального значения  $1/2$ , тогда как изменение фазы в волновом пакете на  $\theta$  приводит к тому, что  $T$  достигает максимального значения  $b^2$ . Между кинетической  $T$  и потенциальной  $V$  энергиями происходит полное перераспределение, за исключением нулевой энергии, равной  $1/2$ . Напротив, в стационарном состоянии  $T = V$  все время и никакого перераспределения энергии не существует.

В классической системе можно создать модель ограниченного перераспределения энергии, допускаемого соотношением (13.25), скорее с помощью ансамбля идентичных вибраторов, чем с по-



мощью одного вибратора. Если колебания вибраторов происходят в различных фазах, то в каждом из них имеет место полное перераспределение энергии, причем это перераспределение периодическое. Но ни в какой момент времени не может быть такого, чтобы энергия всех вибраторов оказалась либо только потенциальной, либо только кинетической. Если распределение фаз по всем возможным значениям равномерно, полная потенциальная энергия и полная кинетическая энергия с течением времени не меняются — в точности, как для квантового вибратора в стационарном состоянии. Как будет показано несколько позднее, это ни в коем случае не единственный способ создания модели квантового вибратора с помощью ансамбля классических вибраторов.

Для полной потенциальной и полной кинетической энергий классического ансамбля характерно, что они не просто подчиняются соотношению (13.25), а осциллируют каждая с частотой, равной удвоенной собственной частоте, т. е.

$$V = \bar{V} + \Delta V \cos 2\tau, \quad T = T_0 - \Delta V \cos 2\tau.$$

В случае квантового вибратора к этому же результату приводит соотношение (13.24). Так как

$$\Psi(\xi, \tau_0 + \tau) = \sum_n a_n \psi_n e^{-i(n+1/2)\tau},$$

то

$$V(\tau_0 + \tau) = \sum_m \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} a_m^* \psi_m \xi^2 a_n \psi_n e^{-i(n-m)\tau} d\xi.$$

После умножения и интегрирования от этого выражения остаются лишь постоянные члены при  $m=n$  или зависящие от времени как  $e^{\pm 2i\tau}$  при  $n-m=\pm 2$ . Именно определенный порядок расположения уровней обеспечивает то, что при всех значениях  $n$  вырабатывается одна и та же основная частота. В нашем случае она равна 2. И именно обращение в нуль величины  $M_{n,m}^{(2)}$  для любых  $|n-m|$ , больших чем два, приводит к ликвидации всех гармоник.

### 13.6. КЛАССИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ $\langle \xi \rangle$

Такой же результат, что и для  $\langle \xi^2 \rangle$ , можно получить для  $\langle \xi \rangle$ :

$$\langle \xi \rangle = \sum_m \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} a_m^* \psi_m \xi a_n \psi_n e^{-i(n-m)\tau} d\xi.$$

Теперь вследствие симметрии только нечетные значения  $|n-m|$  могут вносить вклад в этот интеграл. На самом деле, только когда  $|n-m|=1$ , интеграл не обращается в нуль:

$$M_{n-1,n}^{(1)} = M_{n,n-1}^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \xi \psi_{n-1} d\xi = (n/2)^{1/2}. \quad (13.26)$$

Следовательно,  $\langle \xi \rangle$  состоит только из членов, содержащих  $e^{\pm i\tau}$  (постоянный член равен нулю), и совершает синусоидальные колебания с собственной частотой.

Последний результат может быть получен и без использования Фурье-анализа, непосредственно из уравнения Шредингера с помощью теоремы Эренфеста [5], которая справедлива для любой одномерной системы:

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle p \rangle \quad \text{и} \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\langle \text{grad } V \rangle.$$

Поэтому

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = -\langle \text{grad } V \rangle. \quad (13.27)$$

Потенциал  $V$  может не быть постоянным. Вполне допустимо, чтобы он включал в себя потенциал какой-либо зависящей от времени силы.

Сходство между уравнением (13.27) и классическими выражениями для законов Ньютона является весьма обманчивым. Дело в том, что среднему положению  $\langle x \rangle$  соответствует не значение силы в этой точке  $\langle F(x) \rangle$ , а усредненное по всем возможным положениям значение  $\langle F(x) \rangle$ . Именно поэтому выражение (13.27) прекрасно описывает туннельный переход частицы через барьер — процесс, который в классической механике невозможен. Тем не менее если либо  $\text{grad } V$  постоянен, либо разложение в ряд этой величины не содержит членов более высокого порядка, чем первый, то  $\langle x \rangle$  безусловно удовлетворяет классическому закону. В том случае, когда

$$-\text{grad } V = f_0(t) + x f_1(t),$$

выражение (13.27) принимает вид

$$m d^2 \langle x \rangle / dt^2 = f_0(t) + \langle x \rangle f_1(t) = F(\langle x \rangle). \quad (13.28)$$

Поэтому  $\langle x \rangle$  ведет себя так же, как смещение классической частицы. В частности, если  $f_0=0$  и  $f_1$  постоянно и отрицательно, то  $\langle x \rangle$  совершает гармоническое движение, подчиняющееся закону Гука. Если теперь приложить однородную, не обращающуюся в нуль силу  $f_0(t)$ , то  $\langle x \rangle$  будет вести себя в точности так же, как и смещение классической частицы, подверженной действию силы  $f_0(t)$ . Можно заметить, что если  $f_0=0$  и  $f_1$  содержит зависящую от времени компоненту, то соотношение (13.28) описывает осциллятор, возбуждаемый параметрически посредством изменения коэффициента возвращающей силы. В этом случае  $\langle x \rangle$  ведет себя также в соответствии с классическими законами. Подобное строгое соответствие между квантовым и классическим случаями не распространяется на другие переменные (кроме  $\langle x \rangle$ ). Однако высказанные соображения можно распространить на ансамбль



мощью одного вибратора. Если колебания вибраторов происходят в различных фазах, то в каждом из них имеет место полное перераспределение энергии, причем это перераспределение периодическое. Но ни в какой момент времени не может быть такого, чтобы энергия всех вибраторов оказалась либо только потенциальной, либо только кинетической. Если распределение фаз по всем возможным значениям равномерно, полная потенциальная энергия и полная кинетическая энергия с течением времени не меняются — в точности, как для квантового вибратора в стационарном состоянии. Как будет показано несколько позднее, это ни в коем случае не единственный способ создания модели квантового вибратора с помощью ансамбля классических вибраторов.

Для полной потенциальной и полной кинетической энергий классического ансамбля характерно, что они не просто подчиняются соотношению (13.25), а осциллируют каждая с частотой, равной удвоенной собственной частоте, т. е.

$$V = \bar{V} + \Delta V \cos 2\tau, \quad T = T_0 - \Delta V \cos 2\tau.$$

В случае квантового вибратора к этому же результату приводит соотношение (13.24). Так как

$$\Psi(\xi, \tau_0 + \tau) = \sum_n a_n \psi_n e^{-i(n+1/2)\tau},$$

то

$$V(\tau_0 + \tau) = \sum_m \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} a_m^* \psi_m \xi^2 a_n \psi_n e^{-i(n-m)\tau} d\xi.$$

После умножения и интегрирования от этого выражения остаются лишь постоянные члены при  $m=n$  или зависящие от времени как  $e^{\pm 2i\tau}$  при  $n-m = \pm 2$ . Именно определенный порядок расположения уровней обеспечивает то, что при всех значениях  $n$  вырабатывается одна и та же основная частота. В нашем случае она равна 2. И именно обращение в нуль величины  $M^{(2)}_{n,m}$  для любых  $|n-m|$ , больших чем два, приводит к ликвидации всех гармоник.

### 13.6. КЛАССИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ $\langle \xi \rangle$

Такой же результат, что и для  $\langle \xi^2 \rangle$ , можно получить для  $\langle \xi \rangle$ :

$$\langle \xi \rangle = \sum_m \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} a_m^* \psi_m \xi a_n \psi_n e^{-i(n-m)\tau} d\xi.$$

Теперь вследствие симметрии только нечетные значения  $|n-m|$  могут вносить вклад в этот интеграл. На самом деле, только когда  $|n-m| = 1$ , интеграл не обращается в нуль:

$$M^{(1)}_{n-1,n} = M^{(1)}_{n,n-1} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n \xi \psi_{n-1} d\xi = (n/2)^{1/2}. \quad (13.26)$$

Следовательно,  $\langle \xi \rangle$  состоит только из членов, содержащих  $e^{\pm i\tau}$  (постоянный член равен нулю), и совершает синусоидальные колебания с собственной частотой.

Последний результат может быть получен и без использования Фурье-анализа, непосредственно из уравнения Шредингера с помощью теоремы Эренфеста [5], которая справедлива для любой одномерной системы:

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle p \rangle \quad \text{и} \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\langle \text{grad } V \rangle.$$

Поэтому

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle}{dt^2} = -\langle \text{grad } V \rangle. \quad (13.27)$$

Потенциал  $V$  может не быть постоянным. Вполне допустимо, чтобы он включал в себя потенциал какой-либо зависящей от времени силы.

Сходство между уравнением (13.27) и классическими выражениями для законов Ньютона является весьма обманчивым. Дело в том, что среднему положению  $\langle x \rangle$  соответствует не значение силы в этой точке  $\langle F(x) \rangle$ , а усредненное по всем возможным положениям значение  $\langle F(x) \rangle$ . Именно поэтому выражение (13.27) прекрасно описывает туннельный переход частицы через барьер — процесс, который в классической механике невозможен. Тем не менее если либо  $\text{grad } V$  постоянен, либо разложение в ряд этой величины не содержит членов более высокого порядка, чем первый, то  $\langle x \rangle$  безусловно удовлетворяет классическому закону. В том случае, когда

$$-\text{grad } V = f_0(t) + x f_1(t),$$

выражение (13.27) принимает вид

$$m d^2 \langle x \rangle / dt^2 = f_0(t) + \langle x \rangle f_1(t) = F(\langle x \rangle). \quad (13.28)$$

Поэтому  $\langle x \rangle$  ведет себя так же, как смещение классической частицы. В частности, если  $f_0 = 0$  и  $f_1$  постоянно и отрицательно, то  $\langle x \rangle$  совершает гармоническое движение, подчиняющееся закону Гука. Если теперь приложить однородную, не обращающуюся в нуль силу  $f_0(t)$ , то  $\langle x \rangle$  будет вести себя в точности так же, как и смещение классической частицы, подверженной действию силы  $f_0(t)$ . Можно заметить, что если  $f_0 = 0$  и  $f_1$  содержит зависящую от времени компоненту, то соотношение (13.28) описывает осциллятор, возбуждаемый параметрически посредством изменения коэффициента возвращающей силы. В этом случае  $\langle x \rangle$  ведет себя также в соответствии с классическими законами. Подобное строгое соответствие между квантовым и классическим случаями не распространяется на другие переменные (кроме  $\langle x \rangle$ ). Однако высказанные соображения можно распространить на ансамбль



классических осцилляторов (для которого  $x$  представляет собой вероятность коллективного распределения) и на его отклик либо на воздействие однородной силы, либо на параметрическое возбуждение. В таком случае должен быть известен отклик квантового осциллятора на воздействие кратковременной силы. А этот вопрос более существен, чем то, что сейчас обсуждалось. Искомый результат мы получим в общем виде, а более детально обсудим его в гл. 17.

### 13.7. ИМПУЛЬСНЫЙ ОТКЛИК КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ

Частица, движущаяся в трехмерном потенциальном поле  $V(\mathbf{r})$  и подвергающаяся действию переменной силы  $F(t)$ , направленной по  $x$ , подчиняется уравнению Шредингера:

$$[\hbar^2/(2m)] \nabla^2 \Psi - (V - xF) \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}. \quad (13.29)$$

Предположим теперь, что  $F$  представляет собой кратковременный импульс  $P\delta(t-t_0)$ , действующий в момент времени  $t_0$ . В течение бесконечно малого промежутка времени, когда на систему действует этот импульс,  $F$  полностью доминирует в левой части уравнения. Мгновенную реакцию на импульс можно получить интегрированием уравнения

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{ixF\Psi}{\hbar}.$$

Если  $\Psi_-$  и  $\Psi_+$  представляют собой соответственно волновые функции непосредственно перед воздействием импульса и сразу после него, то

$$\Psi_+ = \Psi_- e^{ix \int F dt/\hbar} = \Psi_- e^{ixP/\hbar}. \quad (13.30)$$

Величина  $\Psi$  остается неизменной, но возникает фазовый сдвиг, пропорциональный  $x$ . Этот результат справедлив для любого импульса, но в случае его малости более удобной может оказаться приближенная формула

$$\Delta \Psi = \Psi_+ - \Psi_- \sim ixP\Psi/\hbar. \quad (13.31)$$

Следует заметить, что соотношение (13.31) может быть получено из уравнения (13.29) непосредственным интегрированием за короткий промежуток времени  $\Delta t$ , в течение которого  $F$  остается постоянной:

$$\Delta \Psi = (ix/\hbar) F \Psi \Delta t + \frac{i}{\hbar} \left( \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi - V \Psi \right) \Delta t.$$

Второе слагаемое представляет собой разложение функции  $\Psi$  при отсутствии возмущающей силы  $F$ , тогда как первое описывает изменения, обусловленные импульсом  $F\Delta t$ . Линейность дифферен-

циального уравнения для  $\Psi$  гарантирует независимость этих процессов друг от друга\*.

Нахождение отклика на импульс (см. § 5.3 первой части книги) начнем с системы, находящейся в нестационарном состоянии, описываемом суммой  $\sum_i a_i \psi_i$  в момент времени  $t=0$ . Если в момент времени  $t_0$ , когда

$$\Psi(t_0) = \sum_i a_i \psi_i e^{-iE_i t_0/\hbar},$$

систему подвергнуть воздействию слабого импульса  $P$ , результирующее изменение волновой функции можно определить из соотношения (13.31):

$$\Delta \Psi(t_0) = (ixP/\hbar) \sum_i a_i \psi_i e^{-iE_i t_0/\hbar}. \quad (13.32)$$

Это изменение функции  $\Psi$  можно представить как изменения  $\Delta a_i$  для каждого значения  $a_i$ . Если после этого система остается невозмущенной, то новые значения  $a_i$  также оказываются постоянными. Поэтому можно определить коэффициенты в момент времени  $t_0$ , записав

$$\Delta a_m = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* e^{iE_m t_0/\hbar} \Delta \Psi(t_0) d\mathbf{r} = (iP/\hbar) \sum_i a_i M_{mi}^{(1)} e^{i(E_m - E_i)t_0/\hbar}. \quad (13.33)$$

В этом соотношении матричные элементы  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* x \psi_i d\mathbf{r}$  обозначены как  $M_{mi}^{(1)} (=M_{im}^{(1)*})$ . Следовательно, через некоторое время  $t$

$$\begin{aligned} \Psi_+(t_0+t) &= \sum_n (a_n + \Delta a_n) \psi_n e^{-iE_n(t_0+t)/\hbar} = \\ &= \Psi_-(t_0+t) + (iP/\hbar) \sum_m \sum_i a_i M_{mi}^{(1)} \psi_m e^{-i(E_i t_0 + E_m t)/\hbar}. \end{aligned} \quad (13.34)$$

Здесь

$$\Psi_-(t_0+t) = \sum_i a_i \psi_i e^{-iE_i(t_0+t)/\hbar}$$

\* Линейность уравнения Шредингера относительно функции  $\Psi$  для произвольной зависимости  $V(\mathbf{r})$  означает, что если любые две функции  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  являются решениями этого уравнения, то и их линейная комбинация  $a_1 \Psi_1 + a_2 \Psi_2$  также является решением. Это не следует путать с линейностью относительно  $x$ , которая свойственна уравнению движения классического гармонического вибратора  $m\ddot{x} + \mu x = F(t)$ . Последний обладает тем свойством, что его отклик на воздействие двух сил  $F_1(t)$  и  $F_2(t)$ , приложенных одновременно, равен сумме откликов на воздействие каждой силы в отдельности. Утверждение о том, что разложение функции  $\Psi$  можно аналогичным образом представить в виде суммы откликов на отдельные составляющие силы, является несправедливым даже для гармонического вибратора (хотя, как следует из уравнения (13.28) для  $\langle x \rangle$ , это свойство выполняется).



представляет собой разложение функции  $\Psi$ , которое возникло бы в отсутствие импульса.

Теперь можно вычислить изменение любой величины. Остановимся подробнее на среднем значении  $\langle x \rangle$ , определяемом как

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx.$$

Из соотношения (13.34) следует, что  $\langle x \rangle$  в функции  $\Psi_-$  имеет один член, который не зависит от  $P$  и отвечает за изменение функции в отсутствие импульса. Другой член, пропорциональный  $P$ , представляет собой искомый отклик на импульс. Членом, содержащим  $P^2$ , можно пренебречь, поскольку в соотношение (13.31) входят только величины первого порядка. Представляя второй член в виде  $\langle \Delta x \rangle$ , для функции отклика на импульс получим

$$h(t) = \langle x \rangle / P = \sum_l \sum_m \sum_n a_n^* a_l M_{m,n}^{(1)} M_{m,l}^{(1)} e^{-i[(E_l - E_n)t_0 + (E_m - E_n)t]/\hbar} + \text{к.с.} \quad (13.35)$$

Очевидно, что в осцилляциях функции  $h(t)$  могут быть представлены многие частоты. Типичным подтверждением этому является частота биений  $(E_m - E_n)/\hbar$  волновых функций, соответствующих состояниям  $m$  и  $n$ . Такой член вполне мог присутствовать и до воздействия импульса. Но, безусловно, в  $h(t)$  входят лишь те изменения в амплитуде, которые появились после импульса. Если в начальный момент система находилась в состоянии  $l$ , то возмущение  $P$  приводит к изменению амплитуды состояния  $m$ :  $\Delta a_m = a_l M_{m,n}^{(1)}$ . Биения для состояний  $m$  и  $n$ , которые обуславливают амплитудный вклад в  $h(t)$ , пропорциональный  $a_m a_n M_{m,n}^{(1)}$ , в первом приближении приводят к изменению  $\Delta a_m \cdot a_n M_{m,n}^{(1)}$ . Поэтому изменения амплитуды на частоте  $(E_m - E_n)/\hbar$  затрагивают три уровня. На это указывает тройное суммирование в выражении (13.35).

Рассмотрим теперь особый случай, когда система вначале находится в  $n$ -м стационарном состоянии, так что  $a_n = 1$ , а все остальные  $a_l$  равны нулю. Тогда тройное суммирование переходит в обычное. Поскольку в стационарном состоянии все моменты времени эквивалентны, можно положить  $t_0$  равным нулю. Следовательно,

$$h(t) + (i/\hbar) \sum_m |M_{m,n}^{(1)}|^2 e^{-i(E_m - E_n)t/\hbar} + \text{к.с.} \quad (13.36)$$

Обозначив  $\omega_{m,n} = (E_m - E_n)/\hbar$  и

$$f_{m,n} = (2m\omega_{m,n}/\hbar) |M_{m,n}^{(1)}|^2,$$

получим \* (см. § 5.3)

\* Заметим, что символом  $m$  здесь обозначены и масса частицы и номер стационарного состояния. В последнем случае  $m$  используется для обозначений только как подстрочный индекс.

$$h(t) = \sum_m [f_{m,n}/(m\omega_{m,n})] \sin \omega_{m,n} t. \quad (13.37)$$

В таком виде отклик системы очень напоминает отклик системы классических осцилляторов с различными частотами  $\omega_{m,n}$  и массами  $m/f_{m,n}$  и это несмотря на то, что рассматриваемая реальная система не обладает сходством с осциллятором, — на самом деле свойства системы даже не были уточнены. Этот факт послужит в дальнейшем основой для последующего общего обсуждения переходов из одного состояния в другое, вызванных переменной во времени силой. Сейчас же мы ограничимся лишь применением этого результата (обнаруженного соответствия) к гармоническому вибратору.

Полезно отметить, однако, одно общее обстоятельство, вытекающее из соотношения (13.35). Оно служит предостережением от слепого использования функции отклика на импульс. Присутствие  $t_0$  в выражении для  $h(t)$  показывает, что в отличие от классического вибратора квантовая система, если она не находится в стационарном состоянии, в различные моменты времени имеет различные отклики. Это легко понять, поскольку каждое значение  $\Delta a_m$  определяется не только амплитудой, но и фазой. Поэтому результат биений с компонентой  $a_n$  зависит и от относительной фазы  $a_m$ , и от той отдельной компоненты  $a_l$ , возмущение которой приводит к изменению  $\Delta a_m$ . Это обуславливает присутствие  $(E_l - E_n)t_0/\hbar$  в фазе.

Не зависящую от времени функцию отклика можно надежно использовать лишь в тех исключительных случаях, когда отклонение системы от стационарного состояния несущественно или же когда имеет место смещение стационарных состояний, хотя и с неизвестными соотношениями фаз. В последнем случае достаточно рассмотреть отклик, усредненный по всем возможным значениям фаз.

Усреднение соотношения (13.35) по фазам приводит к исчезновению всех членов, для которых  $m \neq l$ . В результате получается несколько обобщенная форма соотношения (13.37):

$$h(t) = \sum_m \sum_n a_n^* a_n [f_{m,n}/(m\omega_{m,n})] \sin \omega_{m,n} t. \quad (13.38)$$

Каждый заполненный в исходном состоянии уровень откликается на воздействие независимо от других пропорционально вероятности заполнения  $a_n^* a_n$ . Отклик на любую изменяющуюся во времени функцию можно получить, объединяя результаты по всем функциям отклика и предполагая, что величина  $a_n^* a_n$  меняется не очень сильно. Это и есть условие для рассмотрения отклика как линейного. Бывает [как следует из соотношения (13.28)], что даже при сильных возмущениях гармонический вибратор ведет себя как линейный до тех пор, пока речь идет об отклике  $h(t)$  на  $\langle x \rangle$ . Впрочем, из сказанного выше это не очевидно.



представляет собой разложение функции  $\Psi$ , которое возникло бы в отсутствие импульса.

Теперь можно вычислить изменение любой величины. Остановимся подробнее на среднем значении  $\langle x \rangle$ , определяемом как

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx.$$

Из соотношения (13.34) следует, что  $\langle x \rangle$  в функции  $\Psi_-$  имеет один член, который не зависит от  $P$  и отвечает за изменение функции в отсутствие импульса. Другой член, пропорциональный  $P$ , представляет собой искомый отклик на импульс. Членом, содержащим  $P^2$ , можно пренебречь, поскольку в соотношение (13.31) входят только величины первого порядка. Представляя второй член в виде  $\langle \Delta x \rangle$ , для функции отклика на импульс получим

$$h(t) = \langle x \rangle P = \sum_l \sum_m \sum_n a_n^* a_l M_{m,n}^{(1)} M_{m,l}^{(1)} e^{-i[(E_l - E_n)t_0 + (E_m - E_n)t]/\hbar} + \text{к.с.} \quad (13.35)$$

Очевидно, что в осцилляциях функции  $h(t)$  могут быть представлены многие частоты. Типичным подтверждением этому является частота биений  $(E_m - E_n)/\hbar$  волновых функций, соответствующих состояниям  $m$  и  $n$ . Такой член вполне мог присутствовать и до воздействия импульса. Но, безусловно, в  $h(t)$  входят лишь те изменения в амплитуде, которые появились после импульса. Если в начальный момент система находилась в состоянии  $l$ , то возмущение  $P$  приводит к изменению амплитуды состояния  $m$ :  $\Delta a_m = a_l M_{m,n}^{(1)}$ . Биения для состояний  $m$  и  $n$ , которые обуславливают амплитудный вклад в  $h(t)$ , пропорциональный  $a_m a_n M_{m,n}^{(1)}$ , в первом приближении приводят к изменению  $\Delta a_m \cdot a_n M_{m,n}^{(1)}$ . Поэтому изменения амплитуды на частоте  $(E_m - E_n)/\hbar$  затрагивают три уровня. На это указывает тройное суммирование в выражении (13.35).

Рассмотрим теперь особый случай, когда система вначале находится в  $n$ -м стационарном состоянии, так что  $a_n = 1$ , а все остальные  $a_l$  равны нулю. Тогда тройное суммирование переходит в обычное. Поскольку в стационарном состоянии все моменты времени эквивалентны, можно положить  $t_0$  равным нулю. Следовательно,

$$h(t) + (i/\hbar) \sum_m |M_{m,n}^{(1)}|^2 e^{-i(E_m - E_n)t/\hbar} + \text{к.с.} \quad (13.36)$$

Обозначив  $\omega_{m,n} = (E_m - E_n)/\hbar$  и

$$f_{m,n} = (2m\omega_{m,n}/\hbar) |M_{m,n}^{(1)}|^2,$$

получим \* (см. § 5.3)

\* Заметим, что символом  $m$  здесь обозначены и масса частицы и номер стационарного состояния. В последнем случае  $m$  используется для обозначений только как подстрочный индекс.

$$h(t) = \sum_m [f_{m,n}/(m\omega_{m,n})] \sin \omega_{m,n} t. \quad (13.37)$$

В таком виде отклик системы очень напоминает отклик системы классических осцилляторов с различными частотами  $\omega_{m,n}$  и массами  $m/f_{m,n}$ , и это несмотря на то, что рассматриваемая реальная система не обладает сходством с осциллятором, — на самом деле свойства системы даже не были уточнены. Этот факт послужит в дальнейшем основой для последующего общего обсуждения переходов из одного состояния в другое, вызванных переменной во времени силой. Сейчас же мы ограничимся лишь применением этого результата (обнаруженного соответствия) к гармоническому вибратору.

Полезно отметить, однако, одно общее обстоятельство, вытекающее из соотношения (13.35). Оно служит предостережением от слепого использования функции отклика на импульс. Присутствие  $t_0$  в выражении для  $h(t)$  показывает, что в отличие от классического вибратора квантовая система, если она не находится в стационарном состоянии, в различные моменты времени имеет различные отклики. Это легко понять, поскольку каждое значение  $\Delta a_m$  определяется не только амплитудой, но и фазой. Поэтому результат биений с компонентой  $a_n$  зависит и от относительной фазы  $a_m$ , и от той отдельной компоненты  $a_l$ , возмущение которой приводит к изменению  $\Delta a_m$ . Это обуславливает присутствие  $(E_l - E_n)t_0/\hbar$  в фазе.

Не зависящую от времени функцию отклика можно надежно использовать лишь в тех исключительных случаях, когда отклонение системы от стационарного состояния несущественно или же когда имеет место смещение стационарных состояний, хотя и с неизвестными соотношениями фаз. В последнем случае достаточно рассмотреть отклик, усредненный по всем возможным значениям фаз.

Усреднение соотношения (13.35) по фазам приводит к исчезновению всех членов, для которых  $m \neq l$ . В результате получается несколько обобщенная форма соотношения (13.37):

$$h(t) = \sum_m \sum_n a_n^* a_n [f_{m,n}/(m\omega_{m,n})] \sin \omega_{m,n} t. \quad (13.38)$$

Каждый заполненный в исходном состоянии уровень откликается на воздействие независимо от других пропорционально вероятности заполнения  $a_n^* a_n$ . Отклик на любую изменяющуюся во времени функцию можно получить, объединяя результаты по всем функциям отклика и предполагая, что величина  $a_n^* a_n$  меняется не очень сильно. Это и есть условие для рассмотрения отклика как линейного. Бывает [как следует из соотношения (13.28)], что даже при сильных возмущениях гармонический вибратор ведет себя как линейный до тех пор, пока речь идет об отклике  $h(t)$  на  $\langle x \rangle$ . Впрочем, из сказанного выше это не очевидно.



Функция  $h(t)$  для гармонического вибратора, первоначально находящегося в состоянии  $n$ , имеет особенно простой вид, так как в соответствии с соотношением (13.26) матричные элементы  $M_{m,n}^{(1)}$  обращаются в нуль всегда, кроме тех случаев, когда  $m = n \pm 1$ . В лабораторных переменных

$$|M_{n-1,n}^{(1)}|^2 = [\hbar/(2m\omega_0)] n$$

и

$$|M_{n+1,n}^{(1)}|^2 = [\hbar/(2m\omega_0)] (n+1).$$

Поэтому  $f_{n-1,n} = -n$  и  $f_{n+1,n} = n+1$ . Следовательно (см. § 16.5),

$$h(t) = [(n+1)/(m\omega_0)] \sin \omega_0 t - [n/(m\omega_0)] \sin \omega_0 t = \sin \omega_0 t / (m\omega_0). \quad (13.39)$$

Как и ожидалось, уравнение (13.39) совпадает с классическим выражением для функции отклика на импульс. Тот факт, что исходная величина  $n$  исчезает из соотношения (13.39), делает допустимым (хотя и не доказывает) применение полученного результата в случае произвольного сильного возмущения. Осциллирующий отклик (13.39) является незатухающим, поскольку не был введен механизм затухания. Проблема, связанная с ним, будет рассмотрена в гл. 16 и позднее.

Чтобы перейти от отклика на импульс к отклику на зависящую от времени силу, обратимся к выражению (13.33) и выпишем амплитуды  $a_n$ , представив силу  $F(t)$  в виде последовательности

$$\dot{a}_n = (iF(t)/\hbar) \sum_t a_t M_{n,t}^{(1)} e^{-i\omega_n t}. \quad (13.40)$$

Этот общий результат можно применить и к гармоническому вибратору. Для этого вернемся к зависящему от времени уравнению Шредингера с преобразованными переменными в виде

$$\partial^2 \Psi / \partial \xi^2 - (\xi^2 - 2\xi\Phi) \Psi = -2i\partial \Psi / \partial \tau.$$

Здесь

$$\Phi(\tau) = F(t)/(m\hbar\omega_0^3)^{1/2}.$$

Тогда уравнение (13.40) принимает вид

$$da_n/d\tau = (i\Phi/\sqrt{2}) [n^{1/2} a_{n-1} e^{i\tau} + (n+1)^{1/2} a_{n+1} e^{-i\tau}]. \quad (13.41)$$

В частности, если  $\Phi$  является синусоидально изменяющейся силой

$$\text{Re} [\Phi e^{-i\omega_0(1+\delta)t}],$$

то ее можно представить в виде

$$\frac{1}{2} (\Phi^* e^{i(1+\delta)\tau} + \Phi e^{-i(1+\delta)\tau})$$

и записать четыре слагаемых в выражении (13.41):

$$da_n/d\tau = [i/(2\sqrt{2})] [n^{1/2} a_{n-1} (\Phi^* e^{i(2+\delta)\tau} + \Phi e^{-i\delta\tau}) + (n+1)^{1/2} a_{n+1} (\Phi^* e^{i\delta\tau} + \Phi e^{-i(2+\delta)\tau})].$$

Вблизи резонанса, когда  $\delta \ll 1$ , слагаемые, быстро меняющиеся с частотой  $2+\delta$ , приводят лишь к слабым пульсациям  $a_n$  и их можно не учитывать. Поэтому

$$da_n/d\tau = [i/(2\sqrt{2})] [\Phi n^{1/2} a_{n-1} e^{-i\delta\tau} + \Phi^* (n+1)^{1/2} a_{n+1} e^{i\delta\tau}]. \quad (13.42)$$

По мере приближения  $\delta$  к нулю изменения  $a_n$  устойчиво возрастают. Волновой пакет, следуя классическому движению, осциллирует с амплитудой  $b$ , которая совершает биения с частотой  $\delta$ . При этом максимум амплитуды изменяется обратно пропорционально  $\delta$ . Получается соотношение типа выражения (13.16), в котором  $b$  теперь является функцией времени. Как следует из (13.23), значения  $n$ , соответствующие наиболее сильному возбуждению, осциллируют с частотой  $\delta$ . Зависимость  $a_n^* a_n$  от  $n$  для различных моментов времени представляет собой систему линий, начинающихся, например, в наименьшем состоянии, затем ступеньками поднимающихся вверх по лестнице уровней до тех пор, пока довольно широкий интервал  $\sim (n_c \pm n_c^{1/2})$  не окажется слегка заполненным. Далее происходит возврат к основному состоянию. Потом вся последовательность повторяется без изменений, пока приложена одна и та же синусоидальная сила. Только при резонансе, когда  $e^{\pm i\delta\tau} = 1$ , происходит необратимый рост.

### 13.8. КРИТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ

Решение системы уравнений (13.42) удалось получить без подробных вычислений, поскольку полное решение уравнения (13.21) уже было известно. Помимо всего прочего было известно, что до тех пор, пока  $\delta \neq 0$ , расходимости нет, т. е. всегда существует некоторое значение  $n$ , при превышении которого нельзя обнаружить возбуждения ни для какого момента времени.

Однако в общем случае в выражении (13.42) существует более двух членов, хотя большая часть из них далека от резонанса на произвольной одиночной частоте возбуждения. Поэтому уверенности, что отклик окажется сходящимся или что при изменении приложенной частоты характер разложения  $a_n$  будет меняться очень плавно, нет. Конечно, существуют простые примеры, которые иллюстрируют критические явления, но их трудно разглядеть в системе уравнений, аналогичной (13.42). Подобное происходит и при параметрическом возбуждении гармонического вибратора (см. § 9.10).

Как отмечалось [в соответствии с соотношением (13.28)], при параметрическом возбуждении, создаваемом периодическим изменением постоянной силы,  $\langle x \rangle$  изменяется по классической схеме. Это означает, что при заданной степени возбуждения вблизи частоты  $2\omega_0$  существует некоторый интервал частот, в котором первоначально слабые колебания усиливаются. Если система действительно является гармонической, они возрастают неограниченно по экспоненциальному закону. Поэтому по мере приближения ча-



стоты к значению  $2\omega_0$  изменения  $a_n$  остаются ограниченными. Но при определенной критической частоте они становятся расходящимися. Закономерен вопрос: является ли это следствием специфики уравнений типа (13.42) или свойств, которые приводят к критическим явлениям и которые подлежат исследовать, а затем вычислить истинные значения критических частот? К сожалению, ответ на этот вопрос скорее всего окажется отрицательным, но все же попробуем вывести эти уравнения.

Если модуляция силовой постоянной осуществляется на частоте  $2r\omega_0$ , то значение  $r$  близко к единице и уравнение (13.13) принимает вид

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \xi^2} - \xi^2 (1 - \beta \cos 2r\tau) \Psi = -2i \frac{\partial \Psi}{\partial \tau}. \quad (13.43)$$

Здесь  $\beta$  — мера степени параметрического возбуждения. Будем искать решение в виде (13.14) (с заменой  $n$  на  $l$ ), в котором теперь все значения  $a_l$  могут меняться с течением времени. Подставляя (13.14) в (13.43), умножая на  $\psi_n e^{in\tau}$  и интегрируя по  $\xi$ , получаем

$$\frac{da_n}{d\tau} = \frac{1}{2} i \beta \cos 2r\tau \sum_l a_l M_{l,n}^{(2)} e^{i(n-l)\tau}.$$

Матричные элементы  $M_{l,n}^{(2)}$ , определяемые из соотношения (13.24), не обращаются в нуль только тогда, когда  $l - n = 0$  или  $\pm 2$ . После подстановки их значений и исключения быстро осциллирующих членов, как это делалось при выводе уравнений (13.42), получаем

$$\begin{aligned} \frac{da_n}{d\tau} = & -\frac{1}{8} i \beta [(n+2)^{1/2} (n+1)^{1/2} a_{n+2} e^{2i\delta\tau} + \\ & + n^{1/2} (n-1)^{1/2} a_{n-2} e^{-2i\delta\tau}], \end{aligned} \quad (13.44)$$

где  $\delta = r - 1$ . Отличие (13.44) от уравнений (13.42) состоит в том, что коэффициенты в квадратных скобках при больших  $n$  изменяются здесь скорее пропорционально  $n$ , чем  $n^{1/2}$ . Поэтому высокие уровни обладают большей подвижностью. Не следует удивляться, что при достаточно малых  $\delta$  выражение (13.44) может описывать неконтролируемый процесс, тогда как уравнение (13.42) описывает поведение системы лишь при  $\delta = 0$ .

Для того чтобы смоделировать ситуацию, подобную описанной выше, нужно лишь слегка изменить уравнение (13.42). Слабоангармоничный вибратор с малым затуханием (см. § 9.1) дает дискретный отклик при прохождении частоты возмущающей силы через резонанс. В одном направлении амплитуда возрастает до больших значений, а затем внезапно падает, тогда как в противоположном она остается низкой до тех пор, пока столь же внезапно не взмывает ввысь. Можно предположить, что вид уравнения (13.42) в этом случае почти не меняется, за тем лишь исключени-

ем, что теперь уровни располагаются не совсем равномерно и  $\delta$  следует считать зависящим от  $r$ . Разрывы связаны с прохождением  $\delta$  через нуль при некоторых не равных нулю значениях  $n$  и с внезапными резкими скачками системы.

Однако, как и в случае параметрического возбуждения, очень не просто установить количественные соотношения для критических явлений, когда уравнение (13.41) или другое, подобное ему, исследуется вблизи особых точек.

Случаи критического поведения в квантовых явлениях крайне редки, однако сама возможность их невыявленного существования настораживает. Очень может быть, что этот пример более отчетливо, чем какой-либо другой, демонстрирует различие между возможностями классической и квантовой механики в нахождении выхода из нестандартной ситуации. Классический подход следует ценить хотя бы за те предостережения, которые он делает по поводу потенциальных опасностей в математических джунглях квантовой механики.

### 13.9. ЭКВИВАЛЕНТНЫЙ КЛАССИЧЕСКИЙ АНСАМБЛЬ (σ-ПРЕДСТАВЛЕНИЕ)

Вернемся к невозмущенному вибратору в нестационарном состоянии, волновая функция которого подчиняется уравнению (13.13). Частное решение (13.16) представляет собой простейший пример, иллюстрирующий общее свойство решений уравнения (13.13): если  $\Psi_0(\xi, \tau)$  — некоторое произвольное решение, то и

$$\Psi(\xi, \tau) = \Psi_0(\xi - b \cos \tau, \tau) \exp \left[ -i \left( b \xi \sin \tau_1 - \frac{1}{4} b^2 \sin 2\tau_1 + c \right) \right] \quad (13.45)$$

также является решением. Здесь  $\tau_1 = \tau + \tau_0$ ;  $\tau_0$ ,  $b$  и  $c$  — произвольные действительные постоянные.

Справедливость сделанного утверждения можно проверить, подставив (13.45) в уравнение (13.13). Распределение вероятностей  $\mathcal{P}(\xi, \tau)$ , определенное как  $\Psi \Psi^*$ , не содержит ничего от довольно сложного изменения фазы в уравнении (13.45):

$$\mathcal{P}(\xi, \tau) = \mathcal{P}_0(\xi - b \cos \tau, \tau), \quad (13.46)$$

где  $\mathcal{P}_0 = \Psi_0 \Psi_0^*$ .

Распределение вероятности, соответствующее функции  $\Psi$ , периодически меняется в точности так же, как и распределение, соответствующее функции  $\Psi_0$ , но оно тоже совершает колебания с амплитудой  $b$ .

Покажем теперь, что воздействие силы, зависящей от времени, на систему, первоначально описываемую функцией  $\Psi_0$ , сводится к преобразованию  $\Psi_0$  в  $\Psi$  [в соответствии с уравнением (13.45)] путем последовательного изменения параметров  $b$ ,  $c$  и  $\tau_0$ . Для этой цели достаточно показать, что система, описываемая уравнением



(13.45), просто испытывает некоторые изменения этих параметров под воздействием на нее некоторого произвольного импульса. Оказывается, что после этого импульса и, следовательно, вслед за рядом последовательных изменений, вызванных приложенной переменной силой,  $\mathcal{P}(\xi, \tau)$  продолжает совершать такие же периодические изменения и одновременно колеблется с непрерывно меняющейся амплитудой  $b$ .

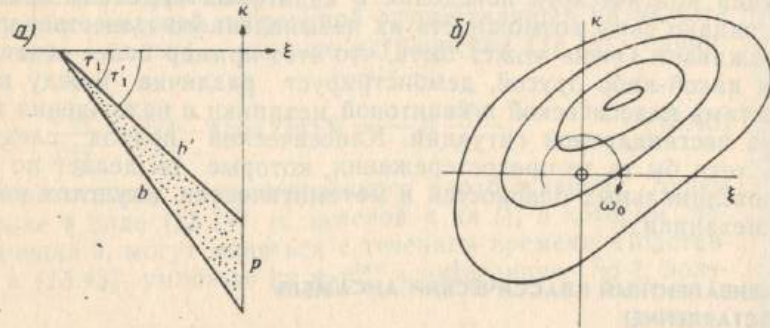


Рис. 13.2. Иллюстрация решений уравнений (13.47)–(13.49) (а); схема  $\sigma$ -представления, показывающая возможные контуры  $\sigma$  на  $(\xi, \kappa)$ -плоскости (б)

Чтобы проиллюстрировать этот результат, допустим, что уравнение (13.45) описывает функцию  $\Psi$  непосредственно перед воздействием импульса  $P$ . Тогда сразу после воздействия в соответствии с точным результатом (13.30)

$$\Psi_+(\xi, \tau) = \Psi_0(\xi - b \cos \tau, \tau) \exp[-i(b\xi \sin \tau_1 - \frac{1}{4}b^2 \sin 2\tau_1 + c - p\xi)]$$

где  $p$  представляет собой приведенную форму  $P$ :

$$Px/\hbar = p\xi.$$

Это выражение для  $\Psi_+$  можно переписать в таком же виде, как (13.45), заменив постоянные на  $b'$ ,  $c'$  и  $\tau'_0$  в соответствии с уравнениями

$$b \cos \tau_1 = b' \cos \tau'_1, \quad (13.47)$$

$$b \sin \tau_1 - p = b' \sin \tau'_1 \quad (13.48)$$

и

$$b - \frac{1}{4}b^2 \sin 2\tau_1 = c' - \frac{1}{4}b'^2 \sin 2\tau'_1. \quad (13.49)$$

Изменение  $c$ , определяемое соотношением (13.49), нас не интересует, хотя можно отметить, что на рис. 13.2, а оно представлено в виде заштрихованного треугольника. На этом же рисунке показано, что  $b$  и  $\tau_1$  изменяются в точности так же, как если бы они

определяли вращающийся по часовой стрелке вектор, описывающий классический осциллятор. Действительная часть (смещение) не зависит от импульса, но мнимая часть (момент) возрастает с увеличением  $p$ .

Теперь можно построить классическую модель, воспроизводящую поведение функции  $\mathcal{P}(\xi, \tau)$  под действием переменной однородной силы. Предположим на мгновение (а потом вскоре докажем), что в отсутствие силы периодические изменения  $\mathcal{P}_0$  всегда можно представить с помощью ансамбля классических вибраторов, определенных двумерным распределением плотности  $\sigma(\mathbf{R})$ , где  $\mathbf{R} = (\xi, \kappa)$ , как показано на рис. 13.2, б. Линии  $\sigma$  можно представить как нанесенные на твердую пластинку, которая вращается вокруг начала координат с такой частотой, что в момент времени  $\tau$  плотность составляет  $\sigma(\xi \cos \tau - \kappa \sin \tau, \xi \sin \tau + \kappa \cos \tau)$ . В любой момент  $\mathcal{P}_0$  представляет собой проекцию  $\sigma$  на ось  $\xi$ :

$$\mathcal{P}_0(\xi, \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\xi \cos \tau - \kappa \sin \tau, \xi \sin \tau + \kappa \cos \tau) d\kappa. \quad (13.50)$$

Из рассуждений, приведенных в последнем параграфе, следует, что реакцию на импульс можно представлять в виде внезапного смещения картины  $\sigma$  (т. е. слоя) в вертикальном направлении на величину  $p$  с последующим продолжением вращения вокруг начала отсчета. Это не меняет характера эволюции  $\mathcal{P}$ , но приводит к колебаниям, вызванным изменениями  $b$  и  $\tau_1$  в уравнении (13.46). Можно рассматривать  $\sigma$  как ансамбль классических вибраторов, каждый из которых описывается вращающимся вектором, причем концы векторов соответствуют распределению плотности  $\sigma$ . Так как  $\xi$ -компонента каждого вектора характеризует мгновенное смещение соответствующего осциллятора, функция  $\mathcal{P}_0(\xi, \tau)$ , определяемая (13.50), описывает распределение смещений в момент  $\tau$ . Можно отметить также, что  $\kappa$ -компоненты ансамбля в точности описывают распределение моментов в функции  $\Psi_0$  и ее изменение с течением времени. Этим объясняется выбор  $\kappa$  в качестве координаты.

Наконец, в завершение этого повествования отметим еще одно обстоятельство: из рис. 13.2, а видно, что если каждый элемент классического ансамбля подвергается воздействию одного и того же импульса  $p$ , то отклик оказывается таким, чтобы привести к модифицированному виду  $\sigma$ . То, что справедливо для произвольного импульса, автоматически оказывается верным и для зависящей от времени силы. Следовательно,  $\sigma$ -представление (термин, которым отныне и впредь мы будем пользоваться, имея в виду классический ансамбль, и который предназначен для описания первоначального распределения вероятностей  $\mathcal{P}_0$  и циклической эволюции этого распределения) будет продолжать правильно описывать явление и в том случае, когда квантовая система (и ее аналог — ансамбль) подвержена действию произвольной однородной силы.



До сих пор ничего не было сказано об условиях, которым должно удовлетворять  $\sigma(\mathbf{R})$  для описания возможного распределения  $\mathcal{P}(\xi, \tau)$ . Очевидно, что не все  $\sigma$  подходят для этого (так, например, узкий локализованный пик не может описывать распределение, возникающее из произвольной действительной волновой функции). Однако установить ограничения на  $\sigma$  не просто. Для наших целей это и не очень важно, но существенным является то, что любые возможные  $\mathcal{P}(\xi, \tau)$  можно представить соответствующими  $\sigma$ . Это легко доказать. Пусть в произвольный момент времени  $\sigma$  выражается двойным интегралом Фурье:

$$\sigma = \iint A(k_\xi, k_\kappa) e^{i(k_\xi \xi + k_\kappa \kappa)} dk_\xi dk_\kappa.$$

Тогда в тот же момент времени  $\mathcal{P}(\xi) = \int \sigma d\kappa$ . В это выражение вносят вклад только те Фурье-компоненты, для которых  $k_\kappa = 0$ :

$$\mathcal{P}(\xi) \sim \int A(k_\xi, 0) e^{ik_\xi \xi} dk_\xi.$$

Следовательно, мгновенное значение  $\mathcal{P}(\xi)$  с помощью преобразования Фурье может быть использовано для определения  $A$  вдоль оси  $\xi$ . Когда  $\sigma$  приобретает новую ориентацию, изменение  $A$  вдоль другого радиуса вновь однозначно определяется величиной  $\mathcal{P}$ . Поэтому любое значение  $\mathcal{P}(\xi, \tau)$  всегда можно представить одним и только одним вращающимся  $\sigma$ . То, что  $\mathcal{P}$  через каждые полпериода принимает обратное значение, является существенным требованием.

В стационарном состоянии  $\sigma$  обладает круговой симметрией и его вращение не приводит ни к каким изменениям. Так, для ненормированного основного состояния, для которого

$$\Psi = e^{-1/2(\xi^2 + \kappa^2)},$$

$\mathcal{P}(\xi)$  меняется как  $e^{-\xi^2}$ , а  $\sigma = e^{-R^2}$ , получается двумерный изотропный гауссовский пик. Если этот узкий пик значительно сместить от начала координат и дать ему возможность вращаться по окружности большого радиуса без изменения формы, то он будет описывать когерентное состояние возбуждения. В противоположность этому стационарное состояние с высокой энергией, скорее определяемое единственным значением  $n$ , чем интервалом (13.21), будет представлено чем-то подобным узкому кольцу с неизменной на нем амплитудой. Средний уровень  $\mathcal{P}(\xi)$  ведет себя в соответствии с классическим распределением  $1/[\pi(\xi_0^2 - \xi^2)^{1/2}]$ , для точного описания которого  $\sigma$  следует полностью расположить на окружности нулевой ширины и радиуса  $\xi_0$ . Отсутствие отмеченных ранее четких максимумов на краях означает, что кольцо, в котором заключен  $\sigma$ , имеет ширину порядка  $1/n^{1/2}$ .

Но это еще не все, поскольку  $\mathcal{P}(\xi)$  осциллирует, когда  $n$  принимает нулевые значения. Для того чтобы воспроизвести эти колеба-

ния, кольцо, соответствующее некой средней генерации, следует дополнить протяженной совокупностью колец с относительно малой амплитудой, для которых  $\sigma$  принимает то положительные, то отрицательные значения. Нет необходимости интересоваться деталями такой совокупности, но следует заметить, что присутствие нулевых значений в  $\mathcal{P}(\xi)$  неизбежно приводит к появлению отрицательных значений  $\sigma$ . Эти отрицательные значения не могут быть объяснены с классических позиций. Отрицательная плотность векторов при  $\xi$  не вносит в  $\mathcal{P}(\xi)$  такого же вклада, как и положительная плотность при  $-\xi$ . Таким образом,  $\sigma$ -представление — это удобный вымысел, не поддающийся реализации. Но это представление окажется весьма полезным позднее.

### 13.10. ЭНЕРГИЯ, СООБЩАЕМАЯ ПРИЛОЖЕННОЙ СИЛОЙ

Теперь следует показать, что произвольно меняющаяся во времени сила изменяет энергию гармонического вибратора в соответствии с классическими представлениями. Для этого достаточно установить результат воздействия произвольного импульса на любое состояние, которое может быть представлено на диаграмме  $\sigma(\xi, \kappa)$ . Из соотношения (13.11) следует, что в любой момент времени потенциальная энергия  $\langle V \rangle$ , определяемая величиной  $1/2 \hbar \omega_0$ , составляет  $\langle \xi^2 \rangle$ , тогда как  $\langle \kappa^2 \rangle$  представляет собой то значение, которое  $\langle V \rangle$  примет через четверть периода, когда фаза изменится на  $\pi/2$ . Как следует из соотношения (13.24),  $\langle \kappa^2 \rangle$  представляет собой кинетическую энергию  $\langle T \rangle$ . Полная энергия

$$E = \langle \xi^2 + \kappa^2 \rangle.$$

Это соответствует сделанным ранее представлениям  $\kappa$  как импульса (см. § 13.2). Записывая  $\xi^2 + \kappa^2$  как  $R^2$ , получим

$$\langle R^2 \rangle = \bar{R}^2 + \langle (R - \bar{R})^2 \rangle.$$

Здесь  $\bar{R}$  — координата центра тяжести распределения.

Ранее было показано, что произвольный импульс приводит к изменению всего распределения в направлении  $\kappa$ , поэтому второе слагаемое не изменяется. Таким образом, достигнут требуемый результат: полная энергия изменяется в точности на такую же величину, как если бы импульс был приложен к классическому вибратору, находящемуся в точке  $\bar{R}$ . Другое доказательство, подробно-сти которого можно опустить, состоит в вычислении

$$\langle T \rangle = -\frac{\hbar}{2m} \int \psi^* \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx$$

и нахождении величины  $\Delta \langle T \rangle$ , когда в импульсе  $P$  функция  $\psi$  заменяется на функцию  $\psi e^{ixP/\hbar}$ , как это было сделано при выводе соотношения (13.30). Тогда в общем случае получаем

$$\Delta \langle T \rangle = P \langle x \rangle + P^2/(2m).$$



Это совпадает с классическим результатом в частном случае гармонического вибратора,  $\langle x \rangle$  для которого, как известно, под воздействием однородной силы ведет себя классическим образом.

Теперь можно выразить обеспокоенность по поводу того, что все уж слишком хорошо совпадает с классической моделью, несмотря на то что известны весьма значительные расхождения с ней. Именно они привели к первоначальному открытию кванта. Средняя энергия вибратора, находящегося в равновесии с газом при температуре  $T$ , не соответствует классическому равномерному распределению энергии  $k_B T$ , а определяется выражением Планка

$$\frac{\hbar \omega_0}{e^{\hbar \omega_0 / (k_B T)} - 1}.$$

При любых температурах его значение меньше, чем  $k_B T^*$ .

Если предположить, что атомы газа, соударяясь с вибратором, воздействуют на него с переменной во времени силой, то приведенные выше рассуждения позволяют надеяться на независимость характера переноса энергии от классического или квантового характера вибратора. Ошибочным является предположение, что вибратор реагирует на соударения так же, как и на заданный импульс. Это не означает, что именно неоднородность силы является причиной отмеченного различия. Здесь кроется нечто более фундаментальное.

Результаты взаимодействия двух атомных систем могут быть определены только путем решения уравнения Шредингера для каждой из них. Неверно полагать, что каждая система воздействует на другую каким-то определенным путем и что проблему двух тел (см. § 20.5) можно расчленить на две проблемы одного тела. Возьмем такой пример: вибратор находится в основном состоянии и подвергается бомбардировке атомом, движущимся столь медленно, что его энергия меньше  $\hbar \omega_0$ . Конечно, часть этой энергии может быть передана вибратору путем классического соударения, и в том случае, когда воздействие рассматривается как слабо зависящая от времени сила и происходит рассеяние квантовой системы,  $\langle E \rangle$  может возрасти. Однако правильное решение, как известно, не должно допускать какой-либо возможности перехода вибратора после взаимодействия в возбужденное состояние. Этого фундаментального изменения в динамике достаточно, чтобы рассеять любые надежды на правомерность предположения о равномерном распределении энергии по степеням свободы.

Возражения с позиций закона сохранения энергии становятся менее серьезными, когда налетающее тело является массивным, поскольку даже если оно движется очень медленно, его энергия

\* Выражение Планка не содержит нулевой энергии  $\frac{1}{2} \hbar \omega_0$  и поэтому описывает среднюю энергию возбуждения, а не полную энергию. Если включить нулевую энергию, то, среднее значение полной энергии составит  $\frac{1}{2} \hbar \omega_0 \times \coth[\hbar \omega_0 / (2 k_B T)]$ . Эта величина больше асимптотического значения при  $T \rightarrow \infty$ , равного  $k_B T$ .

может быть больше, чем  $\hbar \omega_0$ . Вероятно, хотя это и не доказывалось, в случае, когда перенос энергии, вычисленный классическим путем, значительно меньше энергии налетающего тела, можно предположить, что движение тела практически не искажается и отклик вибратора совпадает с откликом на заданную силу (см. § 16.1). С подобной задачей мы столкнемся в гл. 16, когда выясним недопустимость предположения о том, что два квантовых вибратора откликаются на переменную во времени силу независимо друг от друга. Тем не менее, если один из вибраторов очень мал и находится на низком возбужденном уровне, тогда как другой вибратор велик и находится в высоком когерентном колебательном состоянии (близок к классическому осциллятору), можно считать, что первый подвержен действию заданной силы, и это является хорошим приближением.

### 13.11. ПАРАМЕТРИЧЕСКОЕ ВОЗБУЖДЕНИЕ

В § 13.6 уже отмечалось, что теорема Эренфеста обуславливает классическое поведение  $\langle x \rangle$  под влиянием параметрического возбуждения. С помощью рассмотренного только что классического ансамбля можно описать поведение  $\mathcal{P}(\xi, \tau)$  за время действия паполноте, а рассмотрим более детально один пример, с помощью которого легче почувствовать основные характеристики квантового поведения.

Пусть первоначально вибратор находится в своем (ненормированном) основном состоянии

$$\Psi_0 = e^{-1/2(\xi^2 + i\tau)}.$$

Будем искать решение уравнения (13.43) в виде

$$\Psi = e^{-(y\xi^2 + k\tau)}. \quad (13.51)$$

Здесь  $y$  и  $k$  являются функциями  $\tau$ . Чтобы можно было пользоваться этим решением, должны быть выполнены следующие условия:

$$k = i \int y d\tau, \quad (13.52)$$

$$2i \frac{dy}{d\tau} - 4y^2 + 1 + \beta \cos 2\tau = 0. \quad (13.53)$$

Обычно для уравнения Риккати, а именно к этому типу относится уравнение (13.53), вводят функцию  $u(\tau)$  такую, что

$$2iuy = \frac{du}{d\tau}.$$

Тогда

$$\frac{d^2 u}{d\tau^2} + (1 + \beta \cos 2\tau)u = 0. \quad (13.54)$$

Это уравнение является классическим уравнением движения параметрически возбужденного вибратора. Анализ, проведенный в гл. 10, показывает, что для слабого возбуждения ( $\beta \ll 1$ ) и идеаль-



ной настройки ( $r=1$ ) адекватное решение уравнения (13.54) имеет вид

$$u = e^{\Delta c \tau} \cos(\tau + 1/4\pi) + C e^{-\Delta c \tau} \cos(\tau - 1/4\pi) \quad (13.55)$$

(см. § 10.1). Здесь  $\Delta c = 1/4\beta$ .

Этот случай точной настройки достаточно хорошо демонстрирует поведение системы, и мы не будем выходить за его рамки. Теперь не составляет труда получить соответствующее выражение для  $y$ :

$$y(\tau) = \frac{1}{2} \frac{e^{\Delta c \tau} \sin(\tau + 1/4\pi) + C e^{-\Delta c \tau} \sin(\tau - 1/4\pi)}{e^{\Delta c \tau} \cos(\tau + 1/4\pi) + C e^{-\Delta c \tau} \cos(\tau - 1/4\pi)}.$$

В этой записи возбуждение предполагается столь слабым ( $\Delta c \ll 1$ ), что изменение амплитуды в течение периода не наблюдается. Поэтому в уравнении можно пренебречь членами, получающимися при дифференцировании экспоненциальных множителей. Если коэффициенту  $C$  присписать значение  $i$ , то  $y(0)$  принимает значение основного состояния, равное  $1/2$ . Оно соответствует такому начальному условию, при котором возбуждение «включается» в момент времени  $\tau=0$ . Позднее  $y$  осциллирует с удвоенной собственной частотой и волновая функция (13.51), сохраняя гауссовский вид, осциллирует по ширине.

Функция  $k(\tau)$ , представляющая собой сглаженную ступенчатую функцию, со временем становится по форме прямоугольной, но нам, к счастью, не нужно определять ее. Мнимая часть этой функции приводит к таким изменениям фазы поперек волновой функции, при которых фаза вообще исчезает из  $\mathcal{P}(\xi, \tau)$ . В свою очередь, действительная часть обеспечивает сохранение  $\int \mathcal{P} d\xi$  за время осцилляций ширины. Учитывая это, запишем

$$\mathcal{P}(\xi, \tau) \sim (\bar{\xi}^2)^{-1/2} e^{-\bar{\xi}^2/(2\xi^2)}, \quad (13.56)$$

где

$$\bar{\xi}^2 = \frac{1}{\text{Re}[4y]} = \frac{1}{2} \left( p^2 \cos^2 \theta + \frac{1}{p^2} \sin^2 \theta \right), \quad (13.57)$$

$$p = e^{1/4\beta\tau} \text{ и } \theta = \tau - 1/4\pi.$$

По мере экспоненциального роста  $p$  со временем пульсации ширины становятся все сильнее и волновой пакет энергично осциллирует дважды за период между значениями, отличающимися от первоначальной ширины в  $p$  и в  $1/p$  раз.

Именно так и должен вести себя классический ансамбль, к каждому из элементов которого приложено одно и то же возбуждение. Если вектор, описывающий любой отдельный классический вибратор, разложить по ортогональным компонентам, направленным под углами  $\pm 1/4\pi$  к действительной оси, в момент времени  $\tau=0$ , когда прикладывается возбуждение, каждая компонента на-

чинает развиваться независимо: одна растет экспоненциально как  $e^{1/4\beta\tau}$ , а другая уменьшается как  $e^{-1/4\beta\tau}$ . Наблюдатель, вращающийся с частотой, равной собственной, видел бы одну и ту же картину изменений каждого вектора — увеличение в  $p$  раз при значениях  $-1/4\pi$  и уменьшение в  $p$  раз при значениях  $1/4\pi$ . Первоначально изотропное распределение  $\sigma$ , имеющее вид  $e^{-(\xi^2+\kappa^2)}$ , деформируется в эллиптическое гауссовское распределение (рис. 13.3) с отно-

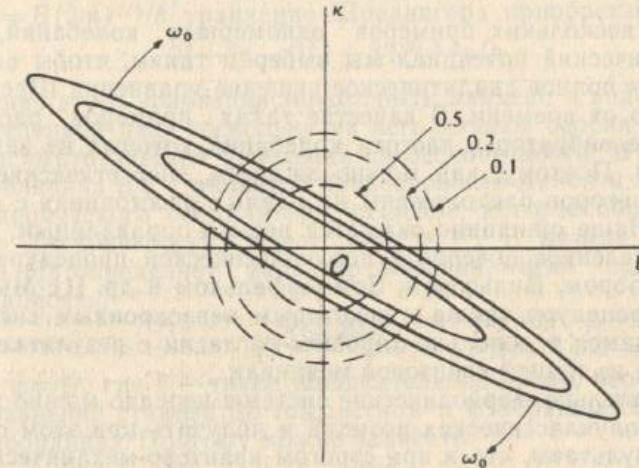


Рис. 13.3. Основное состояние, заданное в  $\sigma$ -представлении круговым распределением Гаусса (штриховые кривые), при параметрическом возбуждении деформируется в эллиптическое распределение Гаусса (сплошные линии);  $p=3$ ; отношение осей составляет 9

шением осей, равным  $p^2$ . В лабораторной системе отсчета этот эллипс вращается с собственной частотой. Его проекция на ось  $\xi$  определяет вид функции  $\mathcal{P}(\xi, \tau)$  в соответствии с выражением (13.56), включающим в себя коэффициент перед экспоненциальным множителем.

Заметим, что функция  $\mathcal{P}(\xi)$  в этом случае все время остается четной и  $\langle x \rangle = 0$ . Справедливость этого утверждения обусловлена симметрией (конечно, если параметрически возбужденный вибратор запускается в стационарном состоянии). И безусловно, сказанное справедливо для классического вибратора, первоначально находившегося в состоянии покоя. В классическом случае может существовать скрытый период перед наступлением какого-нибудь возмущения, вызывающего экспоненциальный рост. Но для квантового вибратора вследствие симметричного развития функции  $\Psi$  такого периода быть не может. Даже в основном состоянии распределение вблизи нуля вносит нечто, приостанавливающее параметрическое возбуждение. Результирующее симметричное колебание  $\mathcal{P}$  не имеет иного классического аналога, за исключением описанного здесь ансамбля.



## 14. АНГАРМОНИЧЕСКИЕ ВИБРАТОРЫ

Начнем с нескольких примеров одномерных колебаний, причем непараболический потенциал мы выберем таким, чтобы оказалось возможным полное аналитическое решение уравнения Шредингера, зависящего от времени. В качестве таких примеров рассмотрим изохронные вибраторы, частота колебаний которых не зависит от амплитуды. Поэтому, как можно ожидать, энергетические уровни таких вибраторов расположены на равных расстояниях с интервалом  $\hbar\omega_0$ . Наше ожидание окажется весьма оправданным, что всеяет определенное доверие к полуклассической процедуре, разработанной Бором, Вильсоном, Зоммерфельдом и др. [1]. Мы применим эту процедуру также к некоторым неизохронным системам и снова убедимся в довольно хорошем согласии с результатами, полученными из точной квантовой механики.

Действительно, периодические системы нередко можно рассматривать с полуклассических позиций и получать при этом столь же точные результаты, что и при строгом квантово-механическом анализе, но с гораздо меньшей затратой сил. Использование такого подхода окупится сторицей в следующей главе; речь в ней пойдет о квантовании электронных циклотронных орбит, которые, как мы уже видели в гл. 8 (см. § 8.7), тесно связаны с гармоническими вибраторами.

Поведение электронов проводимости в полупроводниках, и еще больше в металлах, определяется решеткой, через которую движутся электроны. Полного квантового описания их поведения никогда не удавалось провести. Однако из приближенных вычислений ясно, что полуклассический метод позволяет правильно и очень просто описать множество физических процессов. В гл. 15 бегло будут описаны и такие явления, которые во многих случаях вполне успешно можно рассматривать даже без записи уравнения Шредингера.

### 14.1. ИЗОХРОННЫЕ ВИБРАТОРЫ

В гл. 2 (см. § 2.2) было показано, что потенциал  $ax^2 + b/x^2$  является изохронным с частотой  $\omega_0 = (8a/m)^{1/2}$ , не зависящей от  $b$ . Может показаться, что при  $b=0$  частота равна  $(2a/m)^{1/2}$ . Но каким бы малым ни было  $b$ , потенциал бесконечно возрастает при  $x=0$ . При  $b=0$  парабола  $ax^2$  рассекается  $\delta$ -функцией, поэтому частота удваивается. Только при больших  $b$  яма становится симметричной и приобретает параболическую форму:

$$V \sim 2(ab)^{1/2} + 4a[x - (b/a)^{1/4}]^2.$$

Чтобы избежать изменения высоты основания ямы с изменением  $b$ , определим заново  $V$  как  $(Ax - B/x)^2$ , где  $A^2 = a$ ,  $B^2 = b$  и минимальное значение  $V$  при  $x = (B/A)^{1/2}$  равно нулю. В тех же самых приведенных координатах, что и для гармонического осциллятора,

$$\xi = (m\omega_0/\hbar)^{1/2} x, \quad \varepsilon = 2E/(\hbar\omega_0)$$

и при  $\beta = B(2m)^{1/2}/\hbar$  уравнение Шредингера приобретает вид

$$\psi'' + [\varepsilon - (1/2\xi - \beta/\xi)^2] \psi = 0. \quad (14.1)$$

Решение этого уравнения может быть найдено в виде разложения в степенной ряд, поскольку из него изъяты особая точка при  $\xi=0$  и асимптотическое поведение на бесконечности. В последнем случае величина  $\beta/\xi$  становится пренебрежимо малой и, как в случае гармонического осциллятора, решение, которое обращается в нуль на бесконечности, имеет вид  $e^{-1/2\xi^2}$ . В начале координат величина  $\beta/\xi$  определяет характер решения, тогда приближенно можно записать:

$$\psi'' \approx \beta^2 \psi / \xi^2.$$

Если  $\psi = \xi^s$ , где  $s$  — такое положительное число, что  $s(s-1) = \beta^2$ , уравнение становится тождеством и  $\psi$  обращается в нуль в начале координат. Поэтому можно записать:

$$\psi = \xi^s e^{-1/2\xi^2} F(\xi), \quad (14.2)$$

где

$$s = 1/2 [1 + (1 + 4\beta^2)^{1/2}], \quad (14.3)$$

и искать решение в виде

$$F(\xi) = \sum_0^\infty u_n \xi^n,$$

где  $u_0 \neq 0$ . Подстановка этого подобранного решения в уравнение (14.1) приводит к рекуррентному соотношению

$$\frac{u_{n+2}}{u_n} = \frac{n + s + \frac{1}{2} - \varepsilon - \beta}{(n + s + 2)(n + s + 1) - \beta^2} = \frac{n + s + \frac{1}{2} - \varepsilon - \beta}{(n + s)(n + 2s + 1)}, \quad (14.4)$$

которое стремится к  $1/n$  при  $n \rightarrow \infty$ . Теперь это асимптотическое рекуррентное соотношение эквивалентно разложению  $e^{1/2\xi^2}$  в степенной ряд. Если этот ряд не обрывается, то  $F(\xi) \sim e^{1/2\xi^2}$  при больших  $\xi$ . Тогда  $\psi$ , изменяясь как  $e^{+1/2\xi^2}$ , не уменьшается до нуля на бесконечности.

Именно из-за этого в задаче о гармоническом осцилляторе бесконечный ряд обрывается. В нашем случае  $\varepsilon$  следует выбирать таким, чтобы числитель в соотношении (14.4) обращался в нуль



при некотором значении  $n$ . Тогда  $u_n \xi^n$  окажется последним членом ряда и  $F(\xi)$  сможет расти не быстрее, чем  $\xi^n$ . Экспоненциальный множитель  $e^{-1/2 \xi^2}$  обеспечивает обращение в нуль функции  $\psi$  в бесконечности. В выражении для  $F(\xi)$  содержатся только четные степени  $\xi$ . Если  $n$  представить как  $2\nu$ , то энергия  $\varepsilon_\nu$ , соответствующая уровню  $\nu$ , определится соотношением

$$\varepsilon_\nu = 2\nu + s + \frac{1}{2} - \beta. \quad (14.5)$$

Значит,

$$E_\nu = (\nu + \gamma) \hbar \omega_0, \quad (14.6)$$

где из (14.3) следует, что

$$\gamma = \frac{1}{2} \left[ 1 - \beta + \left( \beta^2 + \frac{1}{4} \right)^{1/2} \right]. \quad (14.7)$$

Как и для гармонического вибратора, энергетические уровни удалены друг от друга на  $\hbar \omega_0$ , но относительная поправка  $\gamma$ , определяющая нулевую энергию  $\gamma \hbar \omega_0$ , не равна  $1/2$ , за исключением того случая, когда  $\beta$  очень велико и яма аппроксимируется параболическим потенциалом. Когда  $\beta=0$ , то  $\gamma=3/4$ , как и следовало бы ожидать для параболы, рассеянной вертикальным барьером. При убранном барьере собственная частота результирующего вибратора составила бы  $\frac{1}{2} \omega_0$ , а энергетические уровни —

$\left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{2} \hbar \omega_0$ . Однако волновые функции, которые обращаются в нуль в начале координат и, следовательно, могут подходить для рассеянного потенциала, возникают только при нечетных значениях  $n$ . Записав  $n=2\nu+1$ , получим энергетические уровни  $\left( \nu + \frac{3}{4} \right) \hbar \omega_0$ , удовлетворяющие уравнению (14.7). Другие значения  $\beta$  приводят к заполнению интервала для  $\gamma$  от  $1/2$  до  $3/4$ , но вне этого интервала структура уровней не меняется.

Конечно, сама волновая функция отличается от той, которая соответствовала гармоническому осциллятору. Для того чтобы соответствовать форме потенциальной ямы, она обязательно должна быть асимметричной, хотя, может быть, и не настолько. На рис. 14.1 представлен случай  $\nu=3$ . Здесь масштаб по горизонтали выбран таким, что классические экстремальные точки совпадают.

Чтобы не сомневаться в строгом равенстве расстояний между уровнями у изохорных вибраторов, рассмотрим противоположный пример, в котором потенциал образован двумя параболическими полужамами, соединенными в самых низких точках:

$$\left. \begin{aligned} V &= \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \quad \text{для } x > 0, \\ V &= \frac{1}{2} \beta^2 m \omega_0^2 x^2 \quad \text{для } x < 0. \end{aligned} \right\} \quad (14.8)$$

При таком потенциале частота равна  $2\beta\omega_0/(1+\beta)$ . По каждую сторону от начала координат для любых значений  $E$  можно найти волновые функции, которые обращаются в нуль на больших удалениях. Теперь квантование возникает из необходимости добиться непрерывности функций  $\psi$  и  $\psi'$  в начале координат.

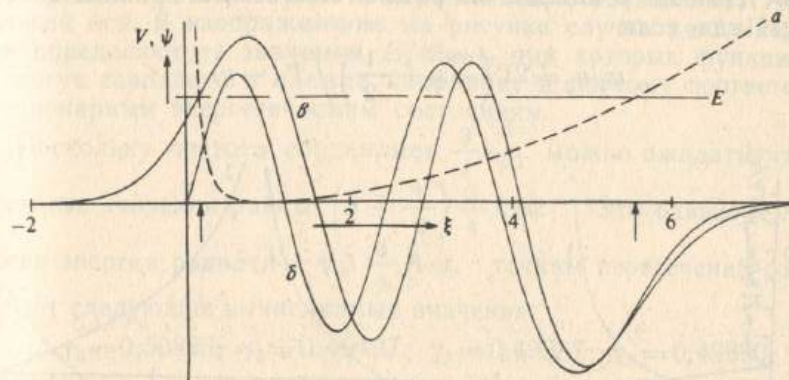


Рис. 14.1. Волновая функция стационарного состояния  $\psi_3$  (кривая б) для изохронного потенциала  $(1/2 \xi - \beta/\xi)^2$  с  $\beta=1/2$  (кривая а). Стрелками отмечены классические особые точки  $V=E$ . Кривая в представляет собой соответствующее решение для гармонического осциллятора с теми же самыми особыми точками

Запишем сначала общее решение при  $x > 0$ , для которого уравнение (13.2) можно применить в тех же самых, что и ранее, переменных (приведенных). Представив  $\psi$  в виде

$$e^{-1/2 \xi^2} \sum_n u_n \xi^n,$$

получим рекуррентную формулу:

$$\frac{u_{n+2}}{u_n} = \frac{2n+1-\varepsilon}{(n+1)(n+2)}. \quad (14.9)$$

Однако теперь отсутствует свобода выбора такого  $\varepsilon$ , при котором ряд обрывается. Вместо этого мы видим, что из соотношения (14.9) вытекают два независимых ряда: один содержит только четные степени, а другой — только нечетные. При больших  $\xi$  каждый ряд ведет себя как  $e^{\pm \xi^2}$ , поскольку при  $n \rightarrow \infty$  имеем  $u_{n+2}/u_n \rightarrow 2/n$ . Чтобы решение было приемлемым, необходимо добиться взаимной компенсации этих рядов при больших  $\xi$ .

Воспользуемся гамма-функцией  $\Gamma(z)$ , обладающей [2] для любого  $z$  следующим свойством:  $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ . Это позволяет компактно выразить коэффициенты  $u_n$ . Если  $n$  четно, то

$$u_n = 2^n \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}n - y\right)}{\Gamma(-y)n!} u_0,$$



$$u_{n+1} = 2^n \frac{\Gamma\left[\frac{1}{2}(n+1) - y\right]}{\Gamma\left(-y + \frac{1}{2}\right)(n+1)!} u_1,$$

где  $y = 1/4(\epsilon - 1)$ . В каждом из рядов слагаемые принимают одинаковый вид, если

$$u_1/u_0 = 2\Gamma\left(-y + \frac{1}{2}\right) / \Gamma(-y).$$

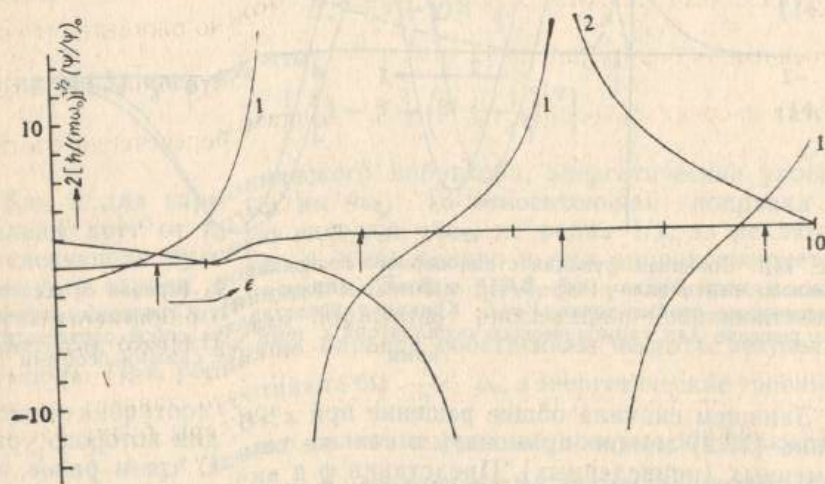


Рис. 14.2. Образование энергетических уровней для частицы в несимметричной параболической потенциальной яме, соответствующих пересечениям (показаны стрелками) кривых 1 и 2. (Подробное описание см. в тексте.)

Если же их знаки противоположны, то они асимптотически взаимно уничтожаются, т. е.

$$u_1/u_0 = -2\Gamma\left(-y + \frac{1}{2}\right) / \Gamma(-y) = 2y \operatorname{tg} \pi y \cdot \Gamma(y) / \Gamma\left(y + \frac{1}{2}\right).$$

Теперь в начале координат  $(d\psi/d\xi)/\psi = u_1/u_0$ .

Поэтому в лабораторных координатах

$$(\psi'/\psi_0) = 1/2 (m\omega_0/\hbar)^{1/2} (\epsilon - 1) \operatorname{tg} [1/4\pi(\epsilon - 1)] \Gamma[1/4(\epsilon - 1)] / \Gamma[1/4(\epsilon + 1)]. \quad (14.10)$$

Эта зависимость представлена кривой 1 на рис. 14.2. Кривая пересекает ось при значениях  $E$ , соответствующих четным стационарным состояниям ( $\psi' = 0$ ) гармонического осциллятора, и возрастает до  $\infty$  при нечетных состояниях ( $\psi = 0$ ).

В отрицательной области при  $x < 0$  кривая ведет себя так же, только знак перед отношением  $(\psi'/\psi)$  меняется на противоположный, а частота  $\omega_0$  заменяется на  $\beta\omega_0$ . Поэтому, чтобы соответствовать тем же значениям  $E$ , кривая 2 должна быть получена из кривой 1 изменением масштаба по горизонтали в  $\beta$  раз, по вертикали — в  $\beta^{1/2}$  раз и отражением относительно горизонтальной оси. В изображенном на рисунке случае  $\beta = 2$ . Пересечения определяют те значения  $E/(\hbar\omega_0)$ , при которых функции  $\psi$  и  $\psi'$  могут совпадать в начале координат и поэтому соответствуют стационарным энергетическим состояниям.

Поскольку частота составляет  $\frac{3}{4}\omega_0$ , можно ожидать, что собственные значения равны  $\left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{3}{4} \hbar \omega_0$ . Это близко к истине.

Когда энергия равна  $(n + \gamma_n) \frac{3}{4} \hbar \omega_0$ , точкам пересечений соответствуют следующие вычисленные значения:

$$\gamma_0 = 0,50895; \gamma_1 = 0,49497; \gamma_2 = 0,49937; \gamma_3 = 0,49890; \\ \gamma_4 = 0,50012 \text{ и т. д.}$$

Несомненно, случаются отклонения от строго равномерного распределения уровней, но они чрезвычайно малы. Некоторые отклонения  $\gamma$  от значения  $1/2$ , вероятно, возникают из-за нарушения непрерывности функции  $d^2V/dx^2$  при  $x = 0$ . Это зависит от того, велика или мала функция  $\psi$ . Некоторые примеры будут рассмотрены ниже.

#### 14.2. ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЯМА ПРОИЗВОЛЬНОЙ ФОРМЫ. ПОЛУКЛАССИЧЕСКИЙ МЕТОД

Рассмотренные только что потенциалы иногда легко поддаются аналитическому исследованию, но в общем случае, когда форма  $V(x)$  произвольна, без компьютера уже не обойтись. Если функция  $V(x)$  симметрична относительно начала координат, ее четность или нечетность упрощают вычисления. Проверочное интегрирование уравнения Шредингера можно начать, полагая  $\psi$  или  $\psi'$  равной нулю в начале координат, и искать такие значения  $E$ , которые приводят к сходимости к нулю на больших удалениях от начала координат.

В случае отсутствия симметрии поиск решений оказывается более трудоемким, так как в некоторых точках теперь приходится правильно подбирать не только  $E$ , но и отношения  $\psi'/\psi$ . Этого можно избежать, если искать не сами волновые функции, а только энергетические уровни и не стремиться при этом к особой точности. Это равносильно предположению, что расстояние между соседними энергетическими уровнями равно  $\hbar\omega$ , что, в свою очередь, допускает существование неизохронных потенциалов, связанных с соответствующими изменениями  $\omega$  при изменении  $E$ .



Все это следует из старой квантовой механики, связанной с именами Бора, Вильсона и Зоммерфельда. К ним следовало бы добавить имя Эренфеста, который подчеркнул, что адиабатические инварианты предоставляют логическую основу для правил квантования, установленных эвристически другими учеными. Каким бы старомодным это положение ни казалось, ему следует уделить некоторое внимание. Сравнивая предсказания, вытекающие из него, с правильными результатами, полученными в тех редких случаях, когда это удастся сделать без специальных рас-

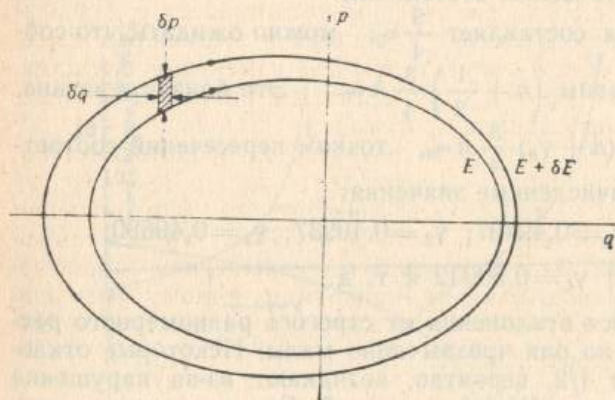


Рис. 14.3. Фазовый портрет классического ангармонического осциллятора

четов, нередко обнаруживаешь, что квазиклассические рецепты удивительно хороши. Стандартное общее рассмотрение, основанное на гамильтоновской динамике, является общедоступным [3]. Поэтому остановимся на той его части, которая касается ангармонических вибраторов. Это позволит придать физический смысл рассуждениям, выглядящим порой сухими и формальными, а порой вообще малопонятными.

Когда некоторая частица совершает свободные колебания без диссипации в статистическом поле с потенциалом  $V(q)$ , ее координата  $q$  и импульс  $p$  изменяются периодически так, что их можно представить в виде замкнутой кривой на фазовой  $q$ - $p$ -плоскости. Гармонический вибратор, у которого  $q$  и  $p$  изменяются по синусоидальному закону со сдвигом по фазе на  $\pi/2$ , описывается эллиптическими траекториями. Но в общем случае о них можно сказать лишь то, что они образуют семейство замкнутых кривых, каждой из которых соответствует одно определенное значение энергии колебаний (рис. 14.3). Имеет место зеркальная симметрия относительно оси  $q$ , так как изменение знака  $p$  на противоположный не приводит к изменению  $E$ .

Вообразим теперь, что потенциал  $V$  медленно деформируется так, что заметные изменения происходят в течение большого числа периода колебаний. Любая величина, которая не меняется из-за этого процесса, является адиабатическим инвариантом.

Полная энергия, разумеется, таковой не является: в любой момент времени возрастание  $V$  в точке, где оказалась частица, приводит к увеличению ее потенциальной энергии, причем на кинетическую энергию частицы это практически не влияет, т. е.  $\dot{E} = \dot{V}$ , где  $\dot{V}$  следует рассматривать как скорость изменения  $V$  в точке нахождения частицы. Одновременные изменения  $E$  и деформация  $V$  сказываются на форме фазовой кривой, но ограниченная ею площадь  $J$ , которую можно также представить как  $\oint p dq$ , остается инвариантной.

Для доказательства этого рассмотрим весь процесс в два этапа. Сначала подвергнем функцию  $V$  слабым и медленным изменениям  $\delta V(q)$  и вычислим результирующее изменение площади, полагая  $E$  неизменным. Затем добавим сюда результат изменения  $E$ , сопровождающего вариацию  $\delta V(q)$ .

Для первого этапа заметим, что если  $(q, p)$  представляет собой точку на первоначальной траектории, то  $(q, p - \delta V(q)/v)$  является точкой на конечной траектории при том же значении энергии (здесь  $v$  обозначена скорость  $p/m$ ). Рост потенциальной энергии  $\delta V(q)$  должен компенсироваться уменьшением кинетической энергии. Это, в свою очередь, приводит к такому уменьшению импульса  $\delta p$ , что  $v \delta p = -\delta V$ . Площадь за один цикл уменьшается на  $\oint \delta p \cdot dq$ . Следовательно,

$$\delta J_1 = - \oint \delta V \cdot dq/v.$$

Для второго этапа время  $dq/v$ , в течение которого частица находится в области  $dq$ , составляет часть всего периода, равную  $dq/(vT)$  (где  $T$  — период колебаний). Поэтому при перемещении через область  $dq$  частица вбирает в себя соответствующую часть изменения  $V$ . В итоге

$$\delta E = \oint \delta V \cdot dq/(vT)$$

и для изменения площади имеем

$$\delta J_2 = \left[ \oint \delta V \cdot dq/(vT) \right] dJ/dE.$$

Если теперь доказать равенство  $dJ/dE = T$ , то из этого будет следовать, что  $\delta J_1 + \delta J_2 = 0$  и что  $J$  — инвариант при медленных изменениях  $V$ . Чтобы довести все до конца, рассмотрим две траектории, разделенные интервалом  $\delta E$ . Пусть типичная точка находится в течение периода внутри замкнутого кольца площадью  $\delta J$ . Поскольку произвольный элемент кольца имеет площадь  $\delta p \delta q$  (рис. 14.3), скорость «прочерчивания» замкнутого кольца  $d(\delta J)/dt$  составляет  $v \delta p$ . Эта величина постоянна и равна  $\delta E$ . Следовательно, интегрирование по всему периоду приведет к искомому результату  $\delta J/T = \delta E$ , или в пределе

$$dJ/dE = T. \quad (14.11)$$



А из этого вытекает, что  $J$  представляет собой адиабатический инвариант.

В основе использования этого результата для обобщения квантовой механики Бора лежит вполне оправданная надежда на следующее: если система находится в разрешенном квантовом состоянии и подвержена медленному возмущению, то никогда не сможет наступить такой момент, когда система окажется спровоцированной на скачкообразный переход в другое состояние. Поэтому медленные возмущения следует автоматически воспринимать как переходы по непрерывной последовательности разрешенных состояний. Каждое квантовое состояние определяется одним или несколькими присвоенными ему наборами квантовых чисел. Они служат для характеристики динамического состояния. Так, например, известно, что при квантовании гармонических осцилляторов величина  $E/(\hbar\omega_0)$  принимает полуцелые значения  $n + \frac{1}{2}$ .

При квантовании атома водорода, согласно теории Бора, единственно разрешенными значениями момента импульса  $L$  являются те, для которых  $L/\hbar = n$ . Если бы можно было исключить проблемы, связанные со скачкообразным переходом возмущений, то адиабатический переход в другое в течение медленных возмущений является величиной  $J$ , являющейся инвариантом, примером которых являются переменными, которым можно было бы приписать квантовые числа. Два примера, рассмотренные нами, иллюстрируют это утверждение.

Фазовая траектория гармонического осциллятора представляет собой эллипс с полуосями  $q_0$  (амплитуда) и  $m\omega_0 q_0$ . Его площадь  $J$  равна  $\pi m\omega_0 q_0^2$ , что составляет  $2\pi E/\omega_0$ . Квантование  $J$  как  $(n + \frac{1}{2})\hbar$  приводит к квантованию  $E$  как  $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0/(2\pi)$ . Что же касается электрона, находящегося на круговой орбите, то его момент импульса является инвариантом при изменениях действующей силы. Естественно поэтому, что этот момент является «кандидатом» в величины, которые можно подвергать квантованию.

Однако на данном этапе ограничимся обсуждением систем с одной переменной, для которых правило квантования Зоммерфельда и Вильсона можно записать так:

$$J = \oint p dq = (n + \gamma) 2\pi \hbar, \quad (14.12)$$

где относительная поправка  $\gamma$  подлежит дальнейшему уточнению.

Для изохронного вибратора  $T = 2\pi/\omega_0$ . Эта величина остается неизменной. Поэтому из уравнения (14.11) следует, что  $J = 2\pi E/\omega_0$ , и из выражения (14.12) вытекает правило квантования Планка:

$$E = (n + \gamma) \hbar \omega_0.$$

Хотя определение поправки  $\gamma$  выходит за пределы полуклассической квантовой механики, именно оно позволяет увеличить

эффективность всего метода. Для всего множества изохронных потенциалов в уравнении (14.1)  $\gamma$  постоянно для каждого произвольно выбранного  $\beta$ . Во всем диапазоне значений  $\beta$  поправка  $\gamma$  может меняться лишь от 1/2 до 3/4.

Остановимся на этом подробнее, определяя  $\gamma$  и ее изменения в зависимости от энергии для нескольких случаев неизохронных потенциалов, таких, когда правильный ответ можно получить с помощью функций, заданных таблицами. Во-первых, рассмотрим прямоугольную яму с равным нулю потенциалом  $V$  в области  $-\frac{1}{2}a < x < \frac{1}{2}a$ . Вне этой области будем считать  $V$  бесконечно большим. Классическая частица движется между стенками (твердыми) с постоянной скоростью. Фазовая траектория представляет собой прямоугольник с основанием  $\Delta q = a$  и высотой  $\Delta p = 2(2mE)^{1/2}$ . Следовательно,  $J = 2a(2mE)^{1/2}$ . Тогда из равенства (14.12) следует значение энергии для уровня с номером  $n$ :

$$E_n = (n + \gamma)^2 \pi^2 \hbar^2 / (2ma^2). \quad (14.13)$$

Эту величину необходимо сравнить с точным результатом

$$(n + \frac{1}{2})^2 \pi^2 \hbar^2 / (2ma^2),$$

вытекающим из условия, что длина волны де Бройля должна быть равна  $2a/(n + 1)$ . В этом случае  $\gamma = 1$  и не зависит от энергии. Следует отметить, что когда в уравнении (14.1)  $\beta = 0$  и потенциал является параболическим на одной стенке и прямоугольным — на другой, точным значением  $\gamma$  является 3/4 (среднее значение между 1/2 для параболического потенциала и 1 для прямоугольного).

Из дальнейшего обсуждения метода ВКБ станет ясно, что  $\gamma$  представляет собой поправку, определяемую граничными условиями, которым удовлетворяет функция  $\psi$  на концах траекторий, и что величина  $\gamma$  является средним арифметическим значением от вкладов этих концов. Утверждая это, мы игнорируем слабый эффект, отмеченный раньше: когда малые флуктуации  $\gamma$  приписывались недостаточной гладкости изменения потенциала.

Далее рассмотрим потенциальную яму с наклонными стенками  $V = \alpha|x|$  (рис. 14.4, а). Классическая частица испытывает одно и то же постоянное ускорение, направленное к началу координат независимо от смещения. Если амплитуда составляет  $x_0$ , то

$$p^2 = 2m\alpha [x_0 - |x|],$$

что определяет фазовую траекторию в виде двух параболических дуг (рис. 14.4, б). Площадь, ограниченная траекторией, составляет

$$\frac{8}{3} x_0^{3/2} \sqrt{2m\alpha}.$$

Следовательно, с учетом (14.12)

$$J_n = (\frac{8}{3}\alpha) (2mE_n^3)^{1/2} = (n + \gamma) 2\pi \hbar.$$



Соответственно

$$E_n = [3/4 \pi a \hbar (n + \gamma)^{2/3} / (2m)]^{1/3}. \quad (14.14)$$

Для того чтобы сравнить этот результат с точным решением, обратим внимание на то, что потенциал  $V$  симметричен относительно начала координат и решения обладают таким свойством:

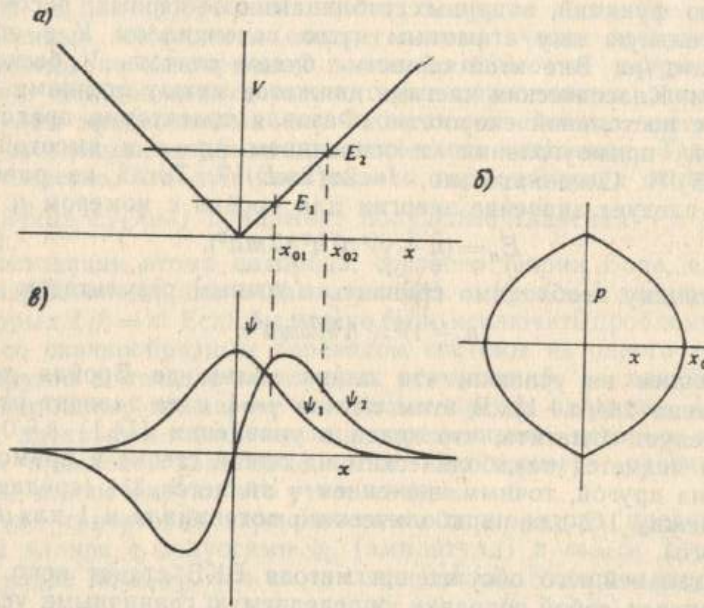


Рис. 14.4. В потенциальной яме (а) частица, совершающая колебания, описывает на фазовой плоскости классическую траекторию (б). Два решения уравнения Шредингера  $\psi_1$  и  $\psi_2$  показаны на рис. в. Классические особые точки отмечены вертикальными штриховыми линиями

либо  $\psi(0)$ , либо  $\psi'(0)$  оказываются равными нулю. Поэтому необходимо рассматривать решения только для положительных значений  $x$ , используя уравнение Шредингера в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + (E - \alpha x) \psi = 0; \quad x > 0. \quad (14.15)$$

Сместим теперь начало координат к классическому пределу  $x_0 = E/\alpha$ , как показано на рис. 14.4, а. Введем

$$z = (2m\alpha/\hbar^2)^{1/3} (x - x_0).$$

Тогда

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} - z\psi = 0; \quad z > -\left(\frac{2m}{\hbar^2\alpha^2}\right)^{1/3} E. \quad (14.16)$$

Это уравнение Эйри. Его решения подробно представлены в виде таблиц [4]. В нашем случае физический смысл имеет только то решение  $\text{Ai}(z)$ , которое плавно убывает до нуля при  $z > 0$  и является колебательным при  $z < 0$ . Квантованными окажутся те значения энергии, которые приводят к обращению в нуль функций  $\text{Ai}(z)$  или ее производной, когда

$$-z = z_n = [2m/(\hbar^2\alpha^2)]^{1/3} E_n.$$

Суммарная волновая функция (примеры которой представлены на рис. 14.4, в) состоит из самой функции и ее зеркального отражения; для сохранения непрерывности функций  $\psi$  и  $\psi'$  в начале координат зеркальное отражение необходимо взять с противоположным знаком. Имеет место чередование нулевых значений функций  $\text{Ai}$  и  $\text{Ai}'$ . Сами же значения могут быть найдены из таблиц [5] с гораздо большей точностью, чем это необходимо здесь.

Из этих же таблиц получают разрешенные значения  $z_n$ . С их помощью без дальнейших расчетов можно определить значения

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\right)^{1/3} z_n.$$

Сопоставление с уравнением (14.14) приводит к тем значениям  $\gamma$ , которые необходимы для правильного ответа, получаемого посредством полуклассической процедуры:

$$n + \gamma = 4z_n^{3/2}/(3\pi).$$

При значениях  $z_n = 1,0188; 2,3381; 3,2482; 4,0879$  и т. д. получаем последовательность  $\gamma_0 = 0,436; \gamma_1 = 0,517; \gamma_2 = 0,485; \gamma_3 = 0,508; \gamma_5 = 0,505; \dots; \gamma_{99} = 0,4996; \gamma_{100} = 0,5003$ . Хотя начиная с некоторого члена в последовательности и устанавливаются значения  $\gamma$ , очень близкие к  $1/2$ , но они все же несколько отличаются от своего среднего значения; подобные отклонения связаны с заострением функции  $V$  в центре. В очень слабой степени эти отклонения зависят и от того, имеет ли функция  $\psi$  максимум в точке заострения или обращается в ней в нуль.

В качестве третьего примера рассмотрим потенциал Морзе

$$V_0(1 - e^{-a(r-r_0)^2}),$$

который часто используют для моделирования взаимодействия между атомами в двухатомной молекуле с энергией связи  $V_0$  и равновесным расстоянием между атомами  $r_0$ . Для этого потенциала уравнение Шредингера можно решить с помощью разложения в ряд, которые приводят к простой форме тесно расположенных энергетических уровней [6]:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0 - \frac{1}{4} \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar^2 \omega_0^2}{V_0}. \quad (14.17)$$

где  $\omega_0 = a(2V_0/m)^{1/2}$  — частота малых колебаний соответствующего классического вибратора. Общее выражение для изменения



частоты в зависимости от энергии можно легко получить интегрированием уравнения (2.11):

$$\omega(\varepsilon) = \omega_0(1 - \varepsilon)^{1/2}, \text{ где } \varepsilon = E/V_0.$$

Так же легко можно определить и фазовый интеграл:

$$\oint p dq = (2\pi\omega_0 m/a^2) [1 - (1 - \varepsilon)^{1/2}].$$

Полуклассическое квантование с использованием уравнения (14.12) приводит к такому же результату, что и (14.17) для  $\gamma = 1/2$ .

Этих примеров достаточно, чтобы проиллюстрировать достоинства полуклассического подхода. И все-таки мы приведем еще один пример — для того лишь, чтобы привлечь внимание читателей к механизму возмущений. Это особенно важно, когда потенциал  $V$  близок к одной из тех форм, для которых уравнение Шредингера можно решить с помощью легко доступных для понимания функций. Математическая процедура описана в обычных учебниках [7], и достаточно сослаться лишь на типичный результат, выбрав симметричный слабоангармоничный потенциал, в котором квадратичная форма дополнена биквадратичной:

$$V = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 + \beta x^4. \quad (14.18)$$

Рассмотрев это выражение с позиций теории возмущений (т. е. выразив функцию  $\psi$  в виде ряда Фурье и используя в качестве базиса волновые функции гармонического осциллятора), мы получим энергетические уровни в виде степенного ряда относительно  $\beta$ . Будем полагать  $\beta$  достаточно малым, т. е. таким, чтобы ряды можно было обрывать после поправок первого порядка. Тогда

$$E_n \approx \hbar \omega_0 [(n + 1/2) + (n^2 + n + 1/2) \Delta], \quad (14.19)$$

где  $\Delta = 3\beta\hbar/(2m^2\omega_0^3)$ .

Посмотрим, при каких значениях полуклассический подход даст тот же самый результат. При  $\beta=0$  траектория для каждого значения  $E$  представляет собой эллипс с площадью, равной  $2\pi E/\omega_0$ . Легко подсчитать поправку первого порядка, обусловленную  $\beta$ . При любых значениях  $p$  из соотношения (14.18) следует, что  $x$  необходимо уменьшить на величину  $\delta x = \beta x^3/(m\omega_0^2)$ , если  $V$ , а следовательно, и  $E$  должны остаться неизменными. Результирующее уменьшение площади составит  $\delta x \cdot dp$  и для поправки первого порядка  $p$  можно записать  $[2m(E - \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2)]^{1/2}$ . Отсюда

$$J = 2\pi E/\omega_0 - 3\beta E^2/(m^2\omega_0^5) = 2\pi E [1 - E\Delta/(\hbar\omega_0)]/\omega_0.$$

Если значения  $E_n$  заданы соотношением (14.19), то

$$J \cong \left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \Delta\right) 2\pi \hbar$$

до первого порядка относительно  $\Delta$ .

Это согласуется с равенством (14.12) при  $\gamma = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \Delta$  независимо от  $n$ . Полуклассическое решение оказывается верным — истинные энергетические уровни (по крайней мере в приближении первого порядка по  $\beta$ ) в точности соответствуют равным приращениям  $J$ . Поскольку необходимость в вычислении  $\gamma$  отсутствует, нельзя считать недостатком решения то обстоятельство, что оно не предсказывает, насколько  $\gamma$  отличается от  $1/2$ . Позднее будет показано, что поправка к  $\gamma$  является положительной, как и следует ожидать из-за возрастания крутизны изменения потенциала, вызванного появлением четвертой степени.

Чтобы иметь какое-то представление о значении поправки, предположим, что эта величина в четвертой степени достаточно велика для обеспечения роста 5-го уровня на  $\hbar\omega_0$ . Таким образом, в соотношении (14.19) положим  $\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right) \Delta$  равным единице при  $n=5$ . Это значительная ангармоничность, но  $\Delta$  остается все еще равным только  $3,3 \cdot 10^{-2}$ , тогда как  $\gamma = 0,508$ . Это изменение невелико.

#### 14.3. ПРИБЛИЖЕНИЕ ВКБ

Почти во всех рассмотренных примерах полуклассический подход с  $\gamma = 1/2$  приводил к успешному предсказанию энергетических уровней. Но, разумеется, он не позволял находить волновые функции и поэтому оказался бессильным в любых других квантовомеханических вычислениях как ожидаемых значений физических величин, так и вероятностей переходов, вызванных зависящими от времени возмущениями. Непосредственное интегрирование с помощью компьютера одномерного уравнения Шредингера не составляет особого труда и доступно всегда, если необходим лишь какой-то числовой результат.

Однако если нас интересует аналитическая зависимость, следует учитывать, что приближение ВКБ [8] обеспечивает промежуточный этап приближения, который, впрочем, может оказаться весьма хорошим, особенно при больших значениях квантовых чисел. В наиболее простом виде, который в большинстве случаев оказывается еще и наиболее полезным, решение уравнения

$$\psi'' + \psi f(x) = 0$$

записывают в виде

$$\psi \approx C f^{-1/4} \exp \left[ i \int_{x_0}^x f^{1/2} dx \right]. \quad (14.20)$$

Такая запись не характерна для волновой механики, однако она полезна тем, что является приближенной формой, примени-



мой к любым задачам, связанным с прямолинейным распространением волн в таких средах, свойства которых меняются с изменением координаты  $x$ . Если  $f^{1/2}$  — локальное значение волнового числа, то  $\int_{x_0}^x f^{1/2} dx$  представляет собой разность фаз для точек

$x_0$  и  $x$  в предположении, что локальное волновое число (несмотря на существование зависимости от  $x$ ) все-таки описывает локальную скорость изменения фазы в зависимости от  $x$ .

Так как фазовая и групповая скорости волны зависят от  $x$ , можно ожидать, что амплитуда также будет изменяться, чтобы сохранить поток любой информации, переносимой волной. Это обеспечивается коэффициентом  $f^{-1/4}$ .

Решение можно легко проиллюстрировать и проверить, сославшись на уравнение Эйри (14.16), для которого  $f(x) = -x$  (как показано на рис. 14.4, а) и для которого (14.20) можно записать в виде

$$\psi = C \bar{x}^{-1/4} \exp\left(\frac{2}{3} i \bar{x}^{3/2}\right). \quad (14.21)$$

Здесь  $x_0$  включено в комплексную постоянную  $C$ , а  $\bar{x}$  обозначена величина  $-x$ . Это выражение представляет собой колебательное решение при отрицательных  $x$  в области, где  $V < E$  и где может находиться классическая частица. В предложенной форме (14.21) описывает бегущую волну, сопровождающую частицу по мере ее спуска по потенциальному склону. Однако частице, заключенной внутри  $V$ -образного потенциала, соответствует стоячая волна, описываемая действительной частью  $\text{Re}[\psi]$ .

Независимо от фазы  $C \text{Re}[\psi]$  представляет собой синусоиду с переменной длиной волны и амплитудой, заключенной внутри огибающей  $\bar{x}^{-1/4}$ . Фаза  $C$  определяет положение нулей. Это приводит к возникновению вопроса, который нельзя разрешить в рамках элементарной ВКБ-теории. Необходимо распространить решение за точку  $x=0$  в область, недоступную для классического метода, где волновая функция должна быстро убывать и обращаться в нуль. Убывание может происходить лишь при правильном размещении нулей.

Математический анализ описанной проблемы, проведенный при помощи асимптотического разложения в ряд решения уравнения (14.16), настолько тонок, что его выполнение можно назвать исторически важным делом. Однако теперь, когда уже составлены обширные таблицы функций Эйри, можно сосредоточиться на сугубо физической стороне вопроса, используя для этого имеющиеся графики. На рис. 14.5 представлены имеющие физический смысл функции  $\text{Ai}(x)$ , которые обращаются в нуль в  $+\infty$ .

\* Действительно,  $\psi^* \sim f^{-1/2}$ , а так как  $f = 2m(E-V)/\hbar^2$ , то  $f^{1/2}$  пропорционально скорости классической частицы, находящейся в точке  $x$ . Поэтому решение ВКБ воспроизводит в изменениях амплитуды классическую вероятность нахождения частицы в любой точке.

Для сравнения по обе стороны от начала координат изображены ВКБ-решения. Для них  $C$  выбрано таким, чтобы обеспечить, насколько это возможно, наилучшее совпадение решений вдали от начала координат:

$$\psi_{\text{ВКБ}} = \pi^{-1/2} \bar{x}^{-1/4} \sin\left(\frac{2}{3} \bar{x}^{3/2} + \frac{1}{4} \pi\right); \quad x < 0; \quad (14.22)$$

$$\psi_{\text{ВКБ}} = \frac{1}{2} \pi^{-1/2} x^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3} x^{3/2}\right); \quad x > 0.$$

Эти выражения фактически являются первыми членами в асимптотических разложениях функции  $\text{Ai}(x)$ .

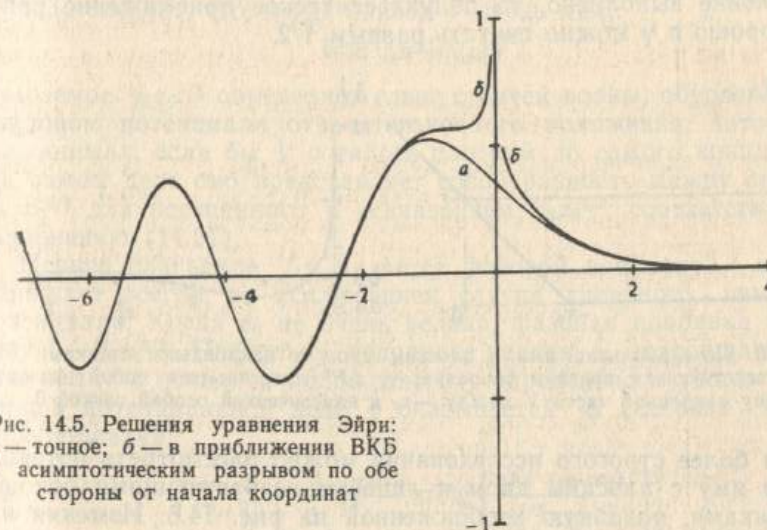


Рис. 14.5. Решения уравнения Эйри: а — точное; б — в приближении ВКБ с асимптотическим разрывом по обе стороны от начала координат

Из рисунка ясно, что ВКБ-решения являются хорошими, за исключением области, примыкающей к началу координат, где локальное волновое число (или коэффициент затухания для положительных  $x$ ) относительно сильно меняется на протяжении длины волны. Анализ показал, что энергетические уровни можно рассчитывать с очень хорошей точностью, рассматривая волну де Бройля как волну на резонансной кривой, используя для определения фазовой длины локальное волновое число и добавляя в качестве поправки на каждом конце по  $1/8$  длины волны [ $1/4\pi$  в первом из уравнений (14.22)]. В действительности эти рекомендации являются в точности полуклассической процедурой квантования. Причем значение  $1/2$  приписывается величине  $\gamma$ , которая является краевой поправкой. Табличные значения  $\gamma$  уже позволили нам убедиться в том, сколь хороши предложенные рекомендации. Теперь с помощью рис. 14.5 мы можем проследо-



вать за их границы и получить на основе метода ВКБ в целом удовлетворительную картину самой волновой функции.

Разумеется, все эти утверждения сделаны на основании только одного уравнения. Но нетрудно проверить, что приближение ВКБ приводит к хорошим результатам и в случаях плавных изменений  $V$ . Лишь в классической особой точке  $E=V$  это приближение становится совершенно непригодным. В этой точке вполне можно рассматривать  $V$  как функцию, линейно зависящую от  $x$  на протяжении всего критического отрезка. Тогда ВКБ-решения с каждой стороны совпадают с функцией Эйри внутри интервала. Для того чтобы это требование выполнялось хотя бы удовлетворительно, необходима только приблизительная линейность функции  $V$  на протяжении хотя бы одного периода колебаний. Если это условие выполнено, то полуклассическое приближение работает хорошо и  $\gamma$  можно считать равным  $1/2$ .

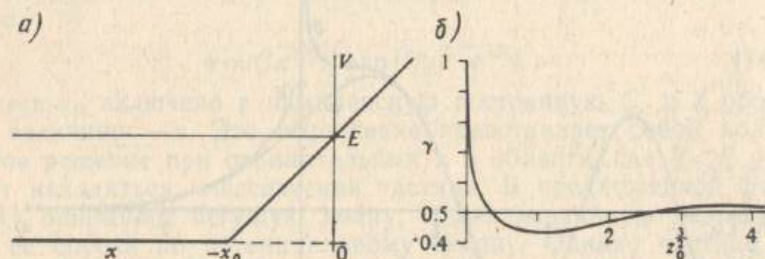


Рис. 14.6. Потенциальная яма с плоским дном и наклонными стенками (а); б — соответствующая краевая поправка;  $\gamma$ ;  $z_0^{3/2}$  представляет собой фазовую длину наклонной части  $V$  между  $-x_0$  и классической особой точкой 0

Для более строгого исследования можно рассмотреть потенциальную яму с плоским дном и линейно возрастающими боковыми стенками, подобную изображенной на рис. 14.6. Изменяя наклон, можно проследить, как  $\gamma$  меняется от  $1/2$  (наклон мал) до 1 (вертикальная стенка). Достаточно рассмотреть только один край такой потенциальной ямы. Если начало координат совпадает с классическим пределом, необходимо использовать ту функцию Эйри, которая при  $x > -x_0$  близка к синусоидальной стоячей волне, возникающей при  $x < -x_0$ . Обозначив  $\alpha$  тангенс угла наклона боковой стенки  $E/x_0$  и введя обозначение

$$z = -(2m\alpha/\hbar^2)^{1/3}x,$$

получим

$$\left. \begin{aligned} \psi &= \text{Ai}(z); & z > -z_0, \\ \psi &= C \cos(pz + \theta); & z < z_0, \end{aligned} \right\} \quad (14.23)$$

где

$$z_0 = (2m\alpha/\hbar^2)^{1/3}x_0 \sim E^{1/3}x_0^{2/3} \quad \text{и} \quad p = [\hbar^2/(2m\alpha)]^{1/3}(2mE)^{1/2}/\hbar = z_0^{1/2}.$$

Для того чтобы  $\psi$  и  $\psi'$  были непрерывны в  $-z_0$ , необходимо выполнение условия

$$z_0^{1/2} \text{tg}(-z_0^{3/2} + \theta) = -\text{Ai}'(-z_0)/\text{Ai}(-z_0).$$

Это уравнение определяет  $\theta$  и, следовательно, задает расположение стоячей волны по отношению к классическому пределу  $z=0$ :

$$\theta = z_0^{3/2} - \text{arctg}\{\text{Ai}'(-z_0)/[z_0^{1/2}\text{Ai}(-z_0)]\}. \quad (14.24)$$

Теперь асимптотическая форма равенства (14.22) для функции  $\text{Ai}(z)$  при больших отрицательных значениях принимает вид

$$\cos[1/4\pi - 2/3(-z)^{3/2}].$$

Отсюда следует, что, когда наклон  $V$  очень мал,

$$\theta \approx 1/4\pi + 1/3z_0^{3/2}.$$

Слагаемое  $1/3z_0^{3/2}$  определяет сдвиг стоячей волны, обусловленный наклоном потенциала относительно того положения, которое он бы занимал, если бы  $V$  осталось плоским до самого конца:  $z=0$ . На самом деле оно представляет собой разность между значением  $z_0^{3/2}$  для постоянного  $V$  и значением  $2/3z_0^{3/2}$ , соответствующим выражению (14.21).

Первое слагаемое  $1/4\pi$  является фазовой поправкой, которая возникает всегда, за исключением случая линейного изменения потенциала. Когда  $z_0$  не очень велико, фазовая поправка составляет  $\theta - 1/3z_0^{3/2}$ . Поскольку поправка, равная  $\pi$ , возвращает стоячую волну в исходное положение и  $\gamma$  определено с учетом обоих торцов потенциальной ямы,  $\gamma$  оказывается в  $2/\pi$  раза меньше этой поправки:

$$\gamma = \frac{2}{\pi} \left\{ \frac{2}{3} z_0^{3/2} - \text{arctg} \left[ \frac{\text{Ai}'(-z_0)}{z_0^{1/2} \text{Ai}(-z_0)} \right] \right\}. \quad (14.25)$$

С помощью таблиц функции Эйри [4] очень легко вычислить  $\gamma$ . Результат показан на рис. 14.6, б. Абсцисса  $z_0^{3/2}$  представляет собой фазовую длину наклонного участка для волны с волновым числом  $(2mE)^{1/2}/\hbar$ , как на плоской части потенциала. На первый взгляд даже удивительно, насколько короткий наклонный участок необходим ( $1/20$  длины волны), чтобы свести  $\gamma$  от единицы до значения, близкого к  $1/2$ . Объяснение как раз и следует искать в той простоте, с которой волновая функция распространяется в область, запрещенную для классического рассмотрения.

Поскольку коэффициент затухания зависит от квадратного корня из убыли энергии, т. е.  $\psi \sim e^{-\mu x}$ , где

$$\mu = [2m(V-E)]^{1/2}/\hbar,$$

лишь очень крутой градиент потенциала способен привести к настолько резкому снижению  $\psi$ , что узел стоячей волны оказывает



ся вблизи от классического предела. Теперь, как можно показать,  $\gamma \approx 1 - 2z_0^{1/2}/(\pi a)$  для небольших  $z_0$ . Поэтому для данного выбора  $E$  величина  $(1-\gamma)$  начинает возрастать как  $x_0^{1/2}$ .

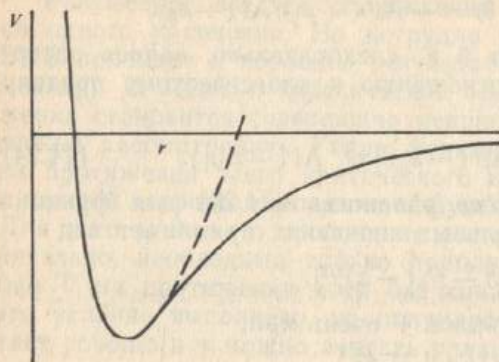


Рис. 14.7. Типичный вид потенциальной энергии взаимодействия двух атомов (сплошная линия) в сравнении с изохронным потенциалом (штриховая линия)

Очевидно, что метод ВКБ с неизменным  $\gamma = 1/2$  сулит успех значительно больший, чем того можно было ожидать.

Возможно, самые важные физические задачи, использующие ангармонические вибраторы, возникают в связи со спектроскопией двухатомных молекул. При малых амплитудах колебаний эти молекулы ведут себя почти как гармонические вибраторы. Расположение уровней, выявляемое из их спектров, почти не меняется (если не принимать во внимание центробежные эффекты расширения, связанные с вращением). Однако при более сильных возбуждениях потенциальная яма становится шире, чем это нужно для изохронных колебаний (рис. 14.7). При этом и частоты, и расстояния между уровнями уменьшаются.

При некотором значении энергии возбуждения молекула диссоциирует. Чуть ниже этого значения колебательная частота весьма мала. В принципе, зная расстояния между энергетическими уровнями, можно попытаться получить обширную информацию о форме потенциальной ямы. Но тем не менее это будет не вся информация, поскольку даже для классического осциллятора сдвиг потенциальной кривой влияет на уровни слабо или не влияет на них совсем. Однако при плотном расположении атомов отталкивающий потенциал столь велик, что любой приемлемый для него аналитический вид на больших удалениях приводит к одному и тому же результату. Поэтому возникающие трудности не являются очень серьезными.

Хорошее толкование процессов, способное определить зависимость  $V(r)$ , было дано Ле-Роем [9]. Читатель будет поражен той огромной ролью, которую играют обобщения метода ВКБ. В противоположность рассуждениям чистой волновой механики эти обобщения весьма доступны, если выполнить точные расчеты не представляется возможным. Благодаря работе [9] нам с большой точностью известны зависимости  $V(r)$  для ряда двухатомных молекул. Без работ Ле-Роа почти все, что можно было бы сказать о характере функции  $V(r)$ , было бы основано только на догадках.

## 15. КОЛЕБАНИЯ И ЦИКЛОТРОННЫЕ ОРБИТЫ В ДВУМЕРНОМ СЛУЧАЕ

Для частицы, движущейся в параболическом потенциале

$$V = \frac{1}{2}\mu_x x^2 + \frac{1}{2}\mu_y y^2,$$

уравнение Шредингера в декартовых координатах имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} (\partial^2 \psi / \partial x^2 + \partial^2 \psi / \partial y^2) + \left( E - \frac{1}{2} \mu_x x^2 - \frac{1}{2} \mu_y y^2 \right) \psi = 0. \quad (15.1)$$

Оно поддается разделению переменных, если записать  $\psi$  в виде произведения:

$$\psi(x, y) = X(x)Y(y).$$

В свою очередь,  $X$  и  $Y$  удовлетворяют уравнению колебаний (13.1):

$$\frac{\hbar^2}{2m} x'' + \left( E_x - \frac{1}{2} m \omega_x^2 x^2 \right) X = 0,$$

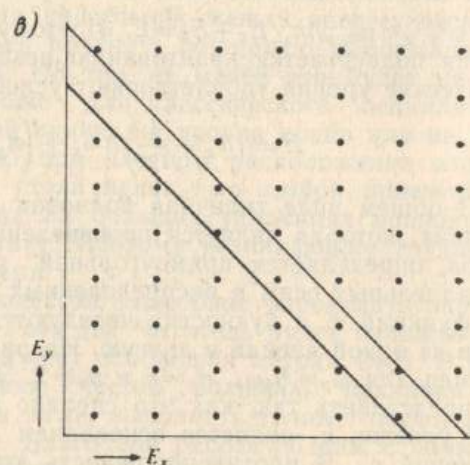
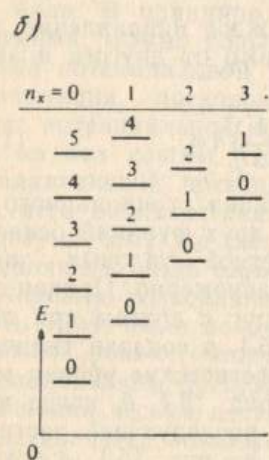
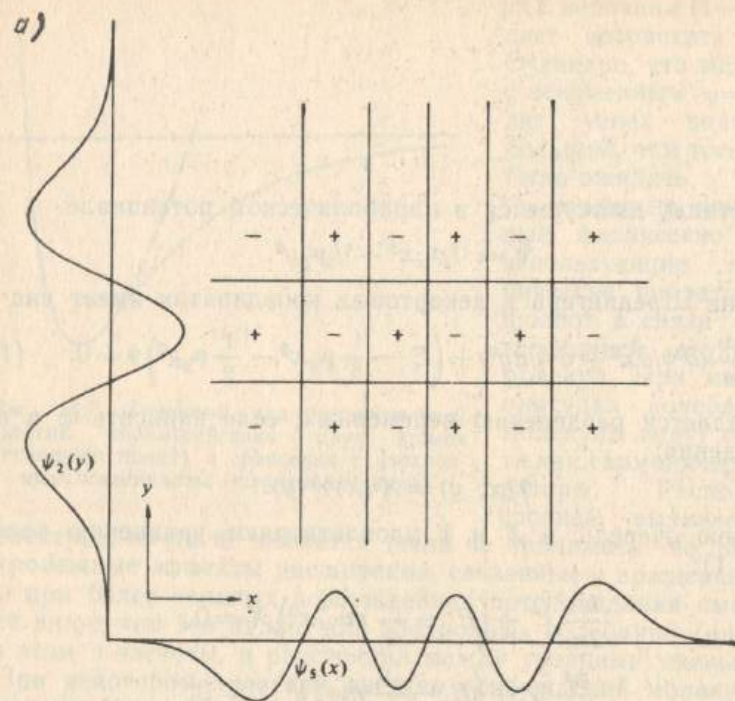
$$\frac{\hbar^2}{2m} y'' + \left( E_y - \frac{1}{2} m \omega_y^2 y^2 \right) Y = 0,$$

где  $\omega_{x,y}^2 = \mu_{x,y}/m$ ,  $E_x + E_y = E$ . Поэтому каждое направление движения подвергается квантованию независимо от другого и энергетические уровни удовлетворяют условию

$$E = \left( n_x + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_x + \left( n_y + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_y. \quad (15.2)$$

В общем виде типичная волновая функция стационарного состояния, которая является произведением двух функций осцилляторов, определяется прямоугольной решеткой узловых линий, параллельных осям и распределенных неравномерно. Причем знаки функций  $\psi$  в пучностях чередуются друг с другом при переходе из одной ячейки в другую. На рис. 15.1, а показан типичный пример для  $\omega_y = 3/4 \omega_x$ ,  $n_x = 5$  и  $n_y = 2$ . Энергетические уровни можно представить так, как это сделано на рис. 15.1, б, когда каждый уровень  $n_x$  является основанием для последующей лестницы значений  $n_y$ . В противоположность этому на рис. 15.1, в показано, что уровни можно изобразить в виде прямоугольной решетки, образованной точками с координатами  $(n_x + 1/2) \hbar \omega_x$  и  $(n_y + 1/2) \hbar \omega_y$ . Состояния с одними и теми же значениями полной





энергии лежат на линиях, расположенных под углом  $45^\circ$ . Линейный рост плотности состояний при изменении  $E$  отчетливо отражен в увеличении длины этих линий.

Аналогия между классическим и квантовым поведением, обсужденная в гл. 13 (см. § 13.4, 13.9) для одномерного и двумерного случаев, справедлива, конечно, и для  $n$ -мерного (при  $n \geq 3$ ) случая, если потенциал может быть представлен в виде положительно-определенной квадратичной формы. Если система переведена из основного состояния в возбужденное с помощью однородной, не зависящей от времени силы, то результирующая волновая функция (конечно, для нестационарного состояния) принимает вид волнового пакета такой же эллиптической гауссовской формы, что и у волновой функции для основного состояния при движении по классической траектории. В общем случае это будет эволюционирующая фигура Лиссажу (см. § 2.4), если только  $\omega_x$  и  $\omega_y$  не связаны простым соотношением.

В частном случае изотропного осциллятора, когда  $\omega_x = \omega_y$ , волновой пакет обладает центральной симметрией. Если систему после возбуждения предоставить самой себе, получим устойчивую эллиптическую траекторию. В отличие от волнового пакета, движущегося в постоянном потенциале (который по мере движения постепенно раскладывается), частное решение уравнения Шредингера для гармонического потенциала (не обязательно изотропного) сколь угодно долго сохраняет свою компактную форму.

Взглянем на это с другой точки зрения. Для этого рассмотрим образование волнового пакета из стационарных состояний. Поскольку нам хочется лучше прочувствовать сами идеи, а не получить временные результаты, возьмем наиболее простой случай круговой траектории. Воспользуемся решением уравнений в полярных координатах. В изотропном случае  $V = \frac{1}{2}\mu r^2$  и подлежащее решению уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + \left( E - \frac{1}{2} \mu r^2 \right) \psi = 0. \quad (15.3)$$

Координаты здесь поддаются разделению, поэтому решение удобно записать в виде

Рис. 15.1. Волновая функция гармонического вибратора в двумерном случае. Стационарное состояние представлено в виде произведения волновых функций  $\psi_n(x)\psi_n(y)$ , узловые линии которых образуют прямоугольную решетку (a); знаки, соответствующие пучностям соседних ячеек, противоположны. Схема энергетических уровней для случая  $\omega_y = \frac{3}{4}\omega_x$  (b); каждый уровень соответствует волновой функции  $\psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)$ ; уровни для различных значений  $n_x$  представлены в виде лесенок со значениями  $n_y$ , указанными над каждой ступенькой. Другой способ представления тех же уровней — в виде точек на двумерной диаграмме (в); все точки, лежащие на линии, проведенной под углом  $45^\circ$ , обладают одним и тем же значением полной энергии; плотность состояний равна числу точек, расположенных между двумя линиями, соответствующими единичной разности значений полной энергии



$$\psi = \frac{1}{r^{1/2}} f(r) e^{i l \Phi},$$

где  $l$  — целое положительное или отрицательное число\*. Удобно также ввести новую меру радиального расстояния, обозначим при этом  $\xi^2 = 2(m\mu)^{1/2} r^2 / \hbar$ . Тогда соотношение (15.3) становится уравнением относительно одной переменной  $f(\xi)$ :

$$f'' + [\varepsilon - (1/2\xi - \beta/\xi)^2] f = 0,$$

где  $\varepsilon = E/(\hbar\omega_0)$ ,  $\beta^2 = l^2 - 1/4$ .

Это уравнение совпадает с уравнением (14.1), что не должно вызывать удивления, ведь потенциальная функция в (14.1) возникает при классическом рассмотрении радиального движения конического маятника и представляет собой сумму возвращающего потенциала  $1/2\mu r^2$  и центробежного потенциала, пропорционального  $r^{-2}$ .

Из уравнения (14.5) немедленно получается соотношение для энергетических уровней

$$E = (2\nu + 1 + |l|) \hbar\omega_0, \quad (15.4)$$

где  $\nu$  — любое положительное число или нуль. Как и ожидалось, из решения, полученного в декартовых координатах, следует, что уровни расположены равномерно с полной начальной энергией  $\hbar\omega_0$  — по  $1/2\hbar\omega_0$  на каждую степень свободы. На всех уровнях, кроме самого низкого, обнаруживается вырождение. На уровне  $E = n\hbar\omega_0$  кратность вырождения составляет  $n$ , поскольку существует  $n$  способов возможного распределения  $(n-1)$ -й элементарной порции  $\hbar\omega_0$  между двумя декартовыми координатами. Именно это и позволяет представлять волновые функции стационарного состояния как линейные комбинации слагаемых, соответствующих вырожденным состояниям.

В нашем случае удобно использовать полярные координаты. Такое представление обеспечивает базис для воссоздания волнового пакета, движущегося по круговой орбите. Возбужденному состоянию с  $\nu=0$  соответствует наибольшее значение  $|l|$ , совместимое с энергией, и поэтому наибольшим является такое значение  $\beta$ , при котором волновая функция удерживается на максимальном удалении от начала координат. Тогда решение принимает вид, аналогичный (14.2), где  $F(\xi)$  постоянно:

$$\psi = C e^{-1/4\xi^2} e^{i l \Phi}. \quad (15.5)$$

При больших  $|l|$  и энергии, равной  $(|l|+1)\hbar\omega_0$ , функция  $\psi$  достигает больших значений лишь в окрестности  $\xi_c = (2|l|)^{1/2}$ . Это классический радиус для кругового движения с энергией  $|l|\hbar\omega_0$ ,

\* Особым является случай аксиальной симметрии  $l=0$ . Но поскольку он не представляет собой трудностей и в нашем случае ничего не поясняет, рассматривать его мы не будем.

т. е. с энергией возбуждения, превышающей энергию основного состояния на  $\hbar\omega_0$ . Приблизненно можно записать

$$\psi \sim e^{-1/4(\xi-\xi_c)^2} e^{i l \Phi},$$

поскольку гауссовский вид радиальных изменений является таким же, что и в основном состоянии, но с центром в точке  $\xi_c$ . Теперь мы находимся уже на половине пути к построению искомого волнового пакета — получен узкий гауссовский радиальный разброс, хотя и без угловых ограничений.

На этом этапе волновую функцию можно образно сравнить с такой моделью: рельсы железнодорожного пути уложены по кругу, а между ними как железнодорожные шпалы — узкие радиальные фронты волн.

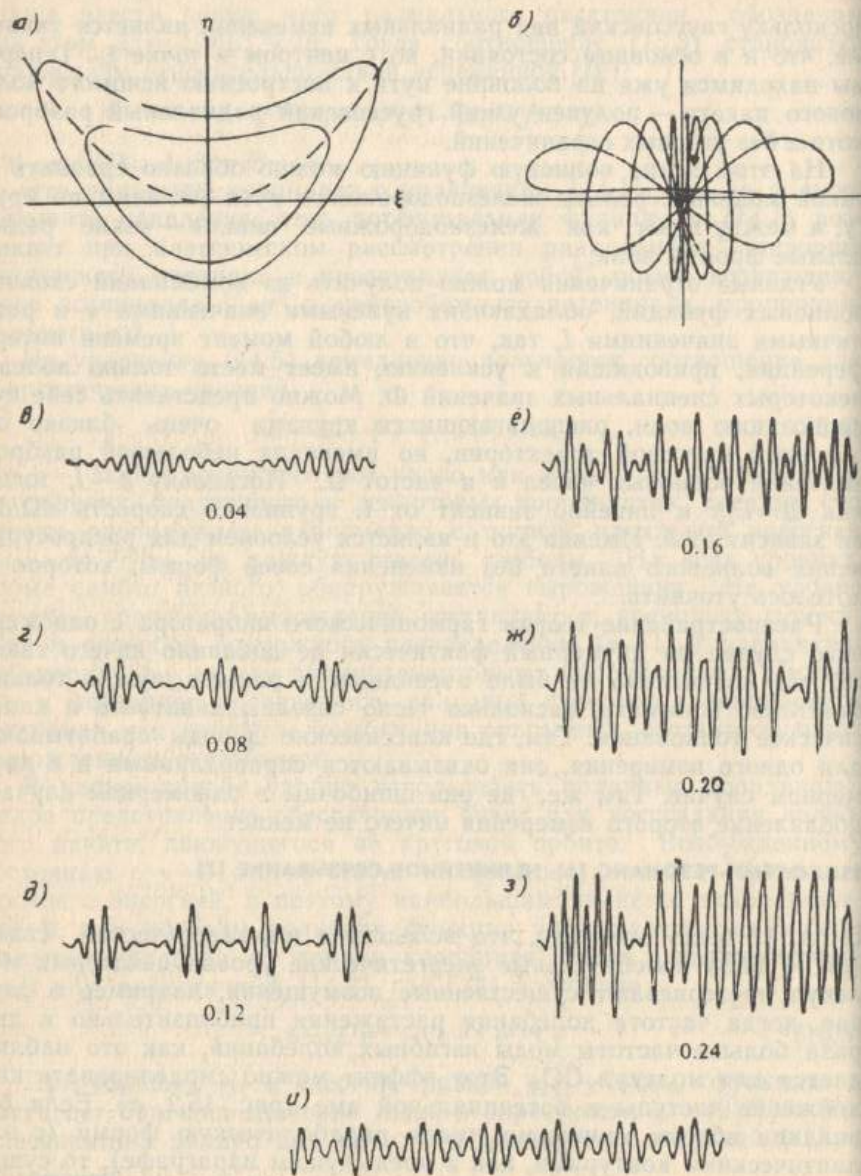
Угловые ограничения можно получить из комбинаций схожих волновых функций, обладающих нулевыми значениями  $\nu$  и различными значениями  $l$ , так, что в любой момент времени интерференция, приводящая к усилению, имеет место только вблизи некоторых специальных значений  $\Phi$ . Можно представить себе суперпозицию волн, располагающихся кругами очень близко от основной круговой траектории, но имеющих небольшой разброс значений волновых чисел  $k$  и частот  $\Omega$ . Поскольку  $k \sim l$ , тогда как  $\Omega = E/\hbar$  и линейно зависит от  $l$ , групповая скорость  $d\Omega/dk$  не зависит от  $k$ . Именно это и является условием для распространения волнового пакета без изменения своей формы, которое и хотелось уточнить.

Распространение теории гармонического вибратора с одномерного случая на двумерный фактически не добавило ничего такого, что интуитивно не было очевидным и раньше, нужно только отчетливо понимать, насколько тесно связаны квантовое и классическое толкования. Там, где классические доводы срабатывают для одного измерения, они оказываются справедливыми и в двумерном случае. Там же, где они ошибочны в одномерном случае, добавление второго измерения ничего не меняет.

#### 15.1. ФЕРМИ-РЕЗОНАНС [1]. НЕЛИНЕЙНОЕ СВЯЗЫВАНИЕ [2]

В гл. 12 было отмечено, что вследствие параметрической связи (см. § 12.3) колебательные энергетические уровни некоторых молекул претерпевают существенные возмущения, например в случае, когда частота колебания растяжения приблизительно в два раза больше частоты моды изгибных колебаний, как это наблюдается для молекул  $\text{CO}_2$ . Этот эффект можно смоделировать как движение частицы в потенциальной яме (рис. 15.2, а). Если бы впадина вблизи минимума имела параболическую форму (с эллиптическими контурами, как в предыдущем параграфе), то существовали бы независимые нормальные моды колебаний, параллельных осям  $x$  и  $y$ ; а если бы частота колебаний в направлении  $y$  была в точности в два раза больше частоты колебаний





в направлении  $x$ , то фигуры Лиссажу при произвольных начальных условиях представляли бы собой замкнутые кривые, подобные тем, что изображены на рис. 2.17, а—е (см. § 2.4).

Однако наличие кривизны у впадины приводит к появлению связи между движениями в направлениях  $x$  и  $y$ , при этом никаких нормальных мод существовать уже не может. Их возникновения можно ожидать лишь в случае квадратичных потенциалов, а в нашем случае потенциал содержит величины в третьей и четвертой степени. При малой кривизне для построения модели потенциал можно выбрать в виде функции:

$$V = \frac{1}{2}\mu x^2 + 2\mu(y - cx^2)^2. \quad (15.6)$$

Считая, что впадина определяется условием  $\partial V/\partial y = 0$ , получаем параболу  $y = cx^2$ . Тогда классические уравнения движению можно записать в виде

$$\begin{aligned} \ddot{\xi} + \xi - 8\xi(\eta - \xi^2) &= 0, \\ \ddot{\eta} + 4(\eta - \xi^2) &= 0, \end{aligned} \quad (15.7)$$

где за единицу времени принята величина  $\sqrt{m/\mu}$ , а за единицу длины — величина  $1/c$ .

Вытекающее из уравнений (15.7) поведение является сложным. Оно сопровождается обменом энергии между  $\xi$ - и  $\eta$ -колебаниями. Для рассмотрения проблемы весьма полезно изучить реальную модель.

Рассмотрим простой маятник, в котором нить слабо заменена пружиной либо сама является пружиной, допускающей большое растяжение. Пусть система приведена в состояние, когда растяжение пружины достигает  $1/4$  полной длины маятника. Тогда частота вертикальных колебаний окажется в два раза больше частоты обычных качаний. Не стоит тратить больших усилий для получения точного соотношения между этими частотами. Небольшие отклонения от идеальной модели не повредят нашему рассмотрению.

Если грузик маятника отклонить вниз и отпустить, то, вероятно, всегда будет существовать малая компонента первоначального горизонтального движения, которая окажется в фазе, необходимой для параметрического усиления. Оно будет происходить до тех пор, пока вертикальное движение полностью не уступит место горизонтальным качаниям. Изменения натяжения на частоте, в два раза

Рис. 15.2. Ангармонический потенциал, определяемый соотношением (15.6) (а); эквипотенциальные линии представлены сплошными кривыми, штрихом показана нижняя часть потенциальной ямы. Рассчитанная траектория (б) для частицы, только начавшей двигаться из точки с координатами (0,01; 0,12). Зависимости  $\xi$  от времени  $t$  (в—з) для частицы, только начавшей движение из точек с координатами (0,01;  $\eta_0$ ); значения  $\eta_0$  приведены под кривыми. Зависимость  $\xi$  от  $t$  (и) для частицы, начавшей движение из начала координат с начальной скоростью ( $\xi_0 = 0$ ;  $\eta_0 = 16,0$ ); полная энергия имеет то же значение, что и в случае г, но период биений значительно меньше



превышающей частоту качаний, в свою очередь, начинают возрождать вертикальные колебания. Раскачка вертикальных колебаний будет происходить до тех пор, пока почти полностью не исчезнут горизонтальные колебания. Затем процесс почти полностью повторится в том же виде. Но то, что каждый взаимный обмен энергией между модами не является полным, приводит к некоторым изменениям всей картины от периода к периоду. Так, если горизонтальное движение окажется очень слабым, потребуется значительное время, чтобы восстановить его с помощью параметрического процесса. При резонансном возбуждении вертикального движения, обусловленного изменением натяжения нити во время колебаний, ничего подобного не наблюдается.

На рис. 15.2 графически изображен процесс обмена энергией в начальной стадии, рассчитанный на основании соотношений (15.7). Если провести вычисления в течение многих периодов, то можно обнаружить прохождение всех точек внутри контура  $V=E$ . Это существенное отличие от линейной системы, в которой энергия каждой нормальной моды сохраняется в отдельности, что ограничивает траекторию точками внутри прямоугольника, вписанного в энергетический контур.

Однако существование в нелинейной системе только одного энергетического инварианта, а не двух, означает, что на траектории в конечном счете представлены все возможные движения, соответствующие данному значению  $E$ . Напротив, внутри контура существует непрерывная последовательность независимых траекторий, проходящих через заданную точку с одной и той же скоростью (определяемой значением  $E$ ), но в различных направлениях. Во всяком случае, такой вывод представляется естественным после анализа рис. 15.2,  $a-d$ . На них показана  $\xi$ -компонента движения после того, как система начала движение из состояния покоя с малыми, но различными начальными смещениями, как отмечено в подписи к рисунку.

На первый взгляд читателю может показаться, что это иллюстрация биений, характерных для одной из компонент фигур Лиссажу (если бы частота биений не возрастала с увеличением амплитуды). Траектории, соответствующие одному и тому же значению энергии, но различным начальным условиям (см., например, рис. 15.2,  $a-u$ ), сохраняют свои характерные различия в точности так же, как и фигуры Лиссажу при различных распределениях полной энергии между двумя координатами. Отметив это, остановимся. У траекторий, соответствующих более высоким значениям энергии (рис. 15.2,  $e-z$ ), устойчивость картины не наблюдается даже при более обстоятельном рассмотрении. Может возникнуть ощущение, что после нескольких периодов устанавливается какая-то равномерность, но это ощущение является иллюзорным. Возможно, между случаями, показанными на рис. 15.2,  $e, ж$ , существует какое-то критическое значение энергии, при котором порядок уступает место хаосу, но этот вопрос не подвергался серьезному исследованию

(см. § 9.7). Тем не менее, хотя это и не всегда является точным, термин «хаотичный» в дальнейшем мы будем использовать для траекторий, соответствующих более высоким значениям энергии.

Квантование подобной системы может значительно уменьшить область хаотического поведения, особенно в тех случаях, когда масса мала и энергетические уровни разнесены далеко друг от друга. Действительно, в молекулярном масштабе очень слабо возбужденные уровни уже обладают энергией, которая в классической системе привела бы к хаотическому поведению. Квантовое рассмотрение в этом случае оказывается значительно более простым. Оно включает в себя лишь использование элементарной теории возмущений.

Следует отметить, что полуклассическое приближение здесь не поможет, поскольку движение является аperiодическим. А это выходит за рамки метода Бора — Вильсона — Зоммерфельда (см. § 14.2), тогда как ВКБ-решение (см. § 14.3) наталкивается на те же трудности, что и классическое, — оно не может в явном виде описать траектории, определяемые соотношением (15.7).

Гамильтониан, определяемый соотношением (15.6), имеет вид

$$\mathcal{H} = (p_x^2 + p_y^2)/(2m) + \frac{1}{2}\mu x^2 + 2\mu(y - cx^2)^2$$

и приводит к уравнению Шредингера

$$\partial^2\psi/\partial X^2 + \partial^2\psi/\partial Y^2 + [\epsilon - X^2 - 4(Y - \gamma X^2)^2]\psi = 0, \quad (15.8)$$

в котором приведенные координаты отличаются от использованных в уравнениях (15.7). Здесь

$$\left. \begin{aligned} X &= \alpha x = \xi/\gamma, \quad Y = \alpha y = \eta/\gamma, \\ \epsilon &= 2E/(\hbar\omega_0) = (2E/\hbar)(m/\mu)^{1/2}, \\ \gamma &= c/\alpha \quad \text{и} \quad \alpha = [\mu/(\hbar\omega_0)]^{1/2}. \end{aligned} \right\} \quad (15.9)$$

В этом виде  $\gamma$  рассматривается как постоянная связи между независимыми в остальном гармоническими колебаниями  $X$  и  $Y$ .

Для того чтобы сопоставить значения, получаемые при классическом и квантовом рассмотрении, заметим, что хаотическое поведение наступает, когда  $\eta_0$  (начальное значение  $\eta$ ) составляет приблизительно 0,16. Тогда энергия колебаний равна  $2\mu\eta_0^2/c^2$ , так что  $\epsilon = 4\mu\eta_0^2/(\hbar\omega_0 c^2) = 4\eta_0^2/\gamma^2 \approx 0,1/\gamma^2$ . Поэтому, если  $\gamma = 0,1$ , состояние  $\epsilon = 10$  (которое является вторым возбужденным уровнем  $Y$ -колебаний на частоте  $2\omega_0$ ) обладает энергией, достаточной для того, чтобы вызвать нарушение в классической системе. Это мы будем иметь в виду при анализе результата толкования уравнения (15.8) с возмущениями первого порядка.

При  $\gamma = 0$  уравнение (15.8) поддается разделению переменных и функция  $\psi$  является произведением гармонических колебательных функций:

$$\psi(X, Y) = \psi_n(X)\psi_m(Y); \quad \epsilon = 2n + 4m + 2. \quad (15.10)$$



Если  $N$  четно, то уровень  $\epsilon = 2(N+1)$  имеет степень вырождения, равную  $1/2 N + 1$ , а если  $N$  нечетно — то  $1/2(N+1)$ . Влияние малого, но не равного нулю  $\gamma$  прежде всего состоит в том, чтобы нарушить его вырождение, обеспечивая возникновение новых состояний, являющихся линейными комбинациями вырожденных состояний. В первом порядке добавкой других невырожденных состояний можно пренебречь и в качестве пробного решения записать

$$\psi_N(X, Y) = \lambda_0 \psi_N(X) \psi_0(Y) + \lambda_1 \psi_{N-2}(X) \psi_1(Y) + \dots \quad (15.11)$$

Подставляя это выражение в уравнение (15.8), находим

$$[\epsilon - 2(N+1) + 8\gamma X^2 Y] (\lambda_0 \psi_N \psi_0 + \lambda_1 \psi_{N-2} \psi_1 + \dots) = 0, \quad (15.12)$$

если в первом приближении пренебречь несущественной величиной  $\gamma^2$ . Умножая левую часть на  $\psi_{N-2m} \psi_m$  и интегрируя по обоим переменным, получаем

$$\lambda_m \Delta + 8\gamma \sum_l M_{N-2l, N-2m}^{(2)} M_{l, m}^{(1)} \lambda_l = 0, \quad (15.13)$$

где  $\Delta$  обозначено смещение энергетического уровня  $\epsilon - 2(N+1)$ , а  $M^{(1)}$  и  $M^{(2)}$  являются матричными элементами, определенными так же, как в (13.26) и (13.24). Следует отметить, однако, что  $M^{(2)}$  относится к осциллятору с частотой  $2\omega_0$  и  $M^{(2)}_{n, n-2} = 1/4 [n(n-1)]^{1/2}$  соответственно. Единственными исчезающими слагаемыми в уравнении (15.13) являются те, для которых  $l = m \pm 1$ . Следовательно,

$$\lambda_{m-1} \gamma a_m + \lambda_m \Delta + \lambda_{m+1} \gamma a_{m+1} = 0, \quad (15.14)$$

где  $a_m = [2m(N-2m+1)(N-2m+2)]^{1/2}$ .

Эта система уравнений относительно  $\lambda_m$  со значениями  $m$ , меняющимися от 0 до  $1/2 N$  или  $1/2(N-1)$ , имеет решение только в том случае, когда определитель, составленный из коэффициентов, равен нулю:

$$\begin{vmatrix} \Delta & \gamma a_1 & 0 & 0 & \dots \\ \gamma a_1 & \Delta & \gamma a_2 & 0 & \dots \\ 0 & \gamma a_2 & \Delta & \gamma a_3 & \dots \\ 0 & 0 & \gamma a_3 & \Delta & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = 0. \quad (15.15)$$

Следовательно, энергетические уровни определены:

$$\epsilon = 2(N+1) + \Delta.$$

Легко вычислить расщепление самых низких уровней. Два самых низких:  $N=0$  и  $N=1$  — невырождены и в приближении первого порядка по  $\gamma$  не возмущены. Следующие два:  $N=2$  и  $N=3$  —

содержат определитель 2-го порядка ( $2 \times 2$ ) и, следовательно, приводят к квадратному уравнению относительно  $\Delta$ . Поэтому эти уровни расщепляются на дублеты, тогда как при  $N=4$  и  $N=5$  возникает кубическое уравнение — появляются триплеты и т. д. Расщепление является симметричным и происходит в соответствии со следующей таблицей:

| $N$ | $\epsilon$ (невозмущенное) | $\Delta$                               |
|-----|----------------------------|----------------------------------------|
| 0   | 2                          | 0                                      |
| 1   | 4                          | 0                                      |
| 2   | 6                          | $\pm 2\gamma$                          |
| 3   | 8                          | $\pm 2\sqrt{3}\gamma$                  |
| 4   | 10                         | 0 и $\pm 4\sqrt{2}\gamma$              |
| 5   | 12                         | 0 и $\pm 8\gamma$                      |
| 6   | 14                         | $\pm 2,516\gamma$ и $\pm 10,662\gamma$ |
| 7   | 16                         | $\pm 4,059\gamma$ и $\pm 13,547\gamma$ |

Дальнейшее решение уравнения (15.15) становится все более трудоемким. Можно, однако, предположить, что и при больших  $N$  уровни более или менее равномерно распределены в пространстве (как в таблице) и суммирование  $\Delta^2$  дает полное пространственное распределение.

Если  $N$  четно, то вычисление определителя (15.15) сводится к решению алгебраического уравнения  $N$ -го порядка, содержащего только четные степени. Сумма всех  $\Delta^2$  равна коэффициенту при  $\Delta^{N-2}$  с противоположным знаком. Этот коэффициент равен  $\gamma^2 \sum a_m^2$ , или  $\gamma^2 N^2(N+2)(N+4)/24$ . Для удобства будем считать  $N$  кратным 4. Тогда равномерно распределенные уровни располагаются соответственно значениям  $\Delta=0, \pm\delta, \pm 2\delta, \dots$ . Следовательно,

$$\delta^2 [1 + 4 + 9 + \dots + (N/4)^2] = \gamma^2 N^2(N+2)(N+4)/24.$$

Так как суммирование в левой части приводит к значению

$$\delta^2 N(N+2)(N+4)/192, \quad (15.16)$$

то  $\delta = (8N)^{1/2} \gamma$ .

Соответственно весь набор уровней лежит в области  $2(N+1) \pm \pm \gamma N^{3/2} / \sqrt{2}$ .

Предположение о равномерном расположении уровней согласуется с систематической амплитудной модуляцией, которая видна на рис. 15.2,  $\epsilon - \delta$ . Для количественного сравнения заметим, что произвольное начальное смещение  $\eta_0$  приводит к колебаниям системы с  $\epsilon = 4\eta_0/\gamma^2$ , поэтому  $N \sim 2\eta_0^2/\gamma^2$ . Следовательно, из (15.16) вытекает ожидаемое значение  $\delta$ , равное  $4\eta_0$ , а энергетический интервал между уровнями  $1/2 \hbar \omega_0 \delta$  составляет  $2\hbar \omega_0 \eta_0$ . Тогда результирующая частота биений равна  $2\omega_0 \eta_0$ , а период биений включает в себя  $1/(2\eta_0)$  периодов  $x$ -колебаний. На рис. 15.2,  $\epsilon$  показаны по-



чти три периода биений, в точности соответствующих начальному значению  $\eta_0 = 0,16$ . Если при меньших значениях  $\eta_0$  биения кажутся несколько более длинными, то объясняется это, вероятно, очень малыми амплитудами в минимуме. При этих обстоятельствах параметрическое усиление является медленным процессом. Но если система, как отмечалось в гл. 13, является квантовой, существование нулевой энергии исключает ранние стадии, присущие классическим системам.

Из последнего рисунка (рис. 15.2, *u*), выполненного для того же значения энергии, что и рис. 15.2, *г*, видно, что при меньшей глубине амплитудной модуляции период биений становится короче, причем теперь он меньше значения, предсказанного соотношением (15.16) (скорее,  $4\frac{1}{2}$  периода, а не  $6\frac{1}{4}$ ). Причина такого изменения периода биений в зависимости от глубины модуляции связана с тем, что энергетические уровни располагаются не в точности равномерно. Воссоздавая такой волновой пакет, мы для соответствия классическому решению предполагаем, что выбор различных уровней осуществляется с учетом начальных условий.

Проведенный анализ позволяет сделать следующий вывод: в пределах первого порядка теория возмущений приводит к хорошим результатам по крайней мере до тех пор, пока частота биений приблизительно равна  $\omega_0/3$ , как показано на рис. 15.2, *е*, т. е. до тех пор, пока расстояние между уровнями составляет приблизительно  $1/3$  первоначального расстояния между вырожденными уровнями. При больших  $N$  каждая полоса начинает расширяться, перекрывая многие соседние полосы. Возможно, самое удивительное заключено в том, что эти полосы не связаны друг с другом и нарушения закономерностей не происходит. Следует отметить, однако, что даже в случае полного возмущения, описываемого величиной  $4(Y - \gamma X^2)^2$  в уравнении (15.8), единственными компонентами волновой функции (15.11), связанными с компонентами функции  $\psi_m(X, Y)$ , относящейся к другому энергетическому уровню, являются те, для которых  $|N - M|$  равно 0, 2 или 4 и значения  $m$  отличаются друг от друга на единицу. Соответственно взаимодействие между уровнями либо полностью отсутствует, либо не очень велико. Этим наверняка и объясняется тот факт, что в вычислениях первого порядка мы достигли столь скромного успеха. Система заслуживает того, чтобы мы изучили ее более подробно как классическим, так и квантовым способом.

## 15.2. ЦИКЛОТРОННЫЕ ОРБИТЫ

Классическая нерелятивистская заряженная частица, свободно перемещающаяся в однородном магнитном поле  $\mathbf{B}$  (см. § 8.7), движется по спиральной орбите с частотой  $eB/m$ , которая не зависит от энергии частицы и, следовательно, от радиуса орбиты  $eB/(2mE)^{1/2}$ . В плоскости, перпендикулярной  $\mathbf{B}$  — единственной, ин-

тересующей нас, — движение весьма напоминает движение конического маятника по круговой орбите. Неудивительно поэтому, что квантово-механические соотношения для частицы и маятника имеют много общего.

Теперь уравнение Шредингера содержит векторный потенциал  $\mathbf{A}$ , определяемый уравнением вихревого поля  $\mathbf{A} = \mathbf{B}$ :

$$(\hbar/i) \nabla - e \mathbf{A} \psi / (2m) - E \psi = 0. \quad (15.17)$$

Здесь  $V$  принято равным нулю повсеместно. К виду этого уравнения предстоит вернуться позднее (см. § 15.3), поэтому сейчас примем его без дополнительного анализа. Если  $\mathbf{A}$  выбрать нерасходящимся, то

$$\hbar^2 \nabla^2 \psi / [2m - i e \hbar \mathbf{A} \cdot \nabla \psi / m + [E - e^2 A^2 / (2m)]] \psi = 0. \quad (15.18)$$

Выбор  $\mathbf{A}$  зависит от используемой системы координат. Рассмотрим два примера, а именно:  $\mathbf{A} = (-By, 0, 0)$  в декартовой системе и  $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}$  в полярных координатах. В этих случаях уравнение (15.18) принимает вид

$$\hbar^2 (\partial^2 \psi / \partial x^2 + \partial^2 \psi / \partial y^2) / (2m) + (i e \hbar B y / m) \partial \psi / \partial x + [E - e^2 B^2 y^2 / (2m)] \psi = 0, \quad (15.19)$$

или

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + \frac{i e \hbar B}{m} \frac{\partial \psi}{\partial \phi} + \left( E - \frac{e^2 B^2 r^2}{8m} \right) \psi = 0. \quad (15.20)$$

В обоих случаях переменные разделяются. Подставляя в уравнение (15.19)  $\psi = Y(y) e^{ikx}$ , получаем, что  $Y$  удовлетворяет уравнению

$$[\hbar^2 / (2m)] Y'' + \{ E - e^2 B^2 [y + \hbar k / (eB)]^2 / (2m) \} Y = 0, \quad (15.21)$$

которое является уравнением гармонического осциллятора с собственной частотой  $\omega_c = eB/m$  и центром притяжения в точке  $y = -\hbar k / (eB)$ . Для большого прямоугольного слоя  $k$  может принимать множество значений, которые позволяют функции  $e^{ikx}$  удовлетворять периодическим граничным условиям, одновременно допуская пригодность функции и по направлению  $x$  внутри границ рассматриваемой области. Поэтому каждый энергетический уровень  $(n + 1/2) \hbar \omega_c$  является сильно вырожденным — оказывается возможным бесконечно большое число представлений волновых функций.

Крайне маловероятно, что при каком-либо произвольном выборе математической процедуры решения уравнения мы получим орбиту, близкую к классической. В рассматриваемом частном случае изменение  $y$  воспроизводит характерное гармоническое движение — это то же самое, как если бы имело место наложение множества волновых функций, тесно располагающихся вблизи классической орбиты, центры которых находятся в разных точках на линии



$y = -\hbar k / (eB)$ , а фазы подобраны так, чтобы обеспечивать монотонно возрастающее изменение фазы  $e^{ikx}$ .

Одну из волновых функций можно получить из решения уравнения (15.20), в котором подстановкой  $\psi = (1/r^{1/2})f(r)e^{i\Phi}$  можно выделить переменную  $\Phi$ . Тогда снова получим уравнение (14.1), в котором

$$\xi = |eB/\hbar|^{1/2}r, \quad \varepsilon = 2E/(\hbar\omega_c) \pm l - \beta \quad \text{и} \quad \beta^2 = l^2 - 1/4.$$

Следовательно,

$$E = (2v + 1 + |l| \mp l) \frac{1}{2} \hbar \omega_c. \quad (15.22)$$

Знак здесь берется такой же, что и у заряда частицы. Разумеется, возникнет уже знакомая структура уровней.

Однако любопытное появление слагаемых  $|l| \mp l$  отражает важное различие между циклотронным движением и движением конического маятника, а именно: в первом случае вращение возможно только в одном направлении. Когда  $v=0$  (а это приводит к волновой функции, максимально соответствующей классической орбите), для положительно-заряженных частиц допустимы только положительные значения  $l$ , т. е. в направлении  $\mathbf{B}$  наблюдается только вращение против часовой стрелки. Наоборот, для отрицательно заряженных частиц допустимы лишь отрицательные значения  $l$  и вращение по часовой стрелке. Иными словами, при больших  $|l|$  решения для частицы, движущейся по классической орбите, подобны решениям для конического маятника. Более того, как и в случае маятника, здесь можно построить устойчивые волновые пакеты, чтобы локализовать частицу на орбите и заставить ее оставаться на ней.

Это должно подбодрить тех читателей, которые привыкли думать о движении частиц лишь с классических позиций. При рассмотрении, например, динамического поведения электронов проводимости в металлах и полупроводниках классический подход является просто необходимым ввиду сложностей, вносимых кристаллической решеткой. Квантовая механика служит лишь для того, чтобы показывать, как электрон может пробираться через идеальную решетку, не испытывая соударений. Она же (квантовая механика) дает выражения для модификации динамических свойств, обусловленной самой решеткой. Если нам удастся выявить особенности эквивалентной классической частицы, моделирующей эти динамические свойства, то квантовую механику можно будет отложить в сторону и рассматривать классические траектории частиц при движении в электрических и магнитных полях с учетом рассеяния частиц на неоднородностях решетки.

Возможность создания устойчивого волнового пакета, который будет следовать по соответствующей классической траектории, вселяет уверенность в том, что безусловный успех классического мыш-

ления в приложении к рассмотренным задачам отнюдь не является простой и счастливой случайностью.

Разумеется, мы не преследовали цели показать, что при наличии магнитного поля пренебрежение дискретной структурой энергетических уровней всегда является безопасным. Сказанное выше может успешно дополнить последующие размышления — они касаются полуклассической процедуры интегрального фазового квантования, которое, как уже было показано, является весьма ценным при рассмотрении ангармонических осцилляторов. Если близкая аналогия между свободной частицей, находящейся на циклотронной орбите, и гармоническим вибратором допустима, то и модификацию динамики, обусловленную кристаллической решеткой, тоже можно рассматривать как аналог (часто — чрезвычайно сложный) ангармоничности. Впрочем, это не создает препятствий для полуклассического квантования.

Рассуждая подобным образом дальше, мы обнаружим ряд интересных и важных моментов, приводящих к довольно странному эффекту в поведении классической частицы. Почти классическая орбита, для которой  $v=0$  и  $l$  велико, имеет периметр, равный  $2\pi v/\omega_c$ , где  $v$  — скорость классической частицы, обладающей той же самой энергией  $\hbar\omega_c$ . На этой орбите укладывается  $l$  длин волн, соответствующих рассматриваемой частице. Следовательно, длина волны, измеренная по всей орбите, составляет  $2\pi v/(\omega_c l)$ , т. е.  $2\hbar/(mv)$ , поскольку  $l = \frac{1}{2}mv^2/(\hbar\omega_c)$ . Эта длина волны в два раза больше того значения, которого наивно можно было бы ожидать для волны де Бройля.

### 15.3. КВАНТОВАНИЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Описанное выше противоречие в поведении частицы в магнитном поле можно объяснить с позиций классической механики. Недиссипативная сила Лоренца может быть представлена с помощью формальных соотношений Лагранжа; для этого нужно ввести новое определение момента импульса, связав его с переменной, определяющей положение частицы. Вместо того чтобы импульс  $\mathbf{p}$  считать равным только  $m\mathbf{v}$ , его следует принять равным  $m\mathbf{v} + e\mathbf{A}$ , так что энергия в форме гамильтониана принимает вид

$$(\mathbf{p} - e\mathbf{A})(\mathbf{p} - e\mathbf{A})/(2m) + V(\mathbf{r}).$$

Переход к уравнению Шредингера путем подстановки  $\mathbf{p} = \hbar\nabla/i$  приводит к выражению вида (15.17). Иными словами, длина волны де Бройля определяется скорее величиной  $m\mathbf{v} + e\mathbf{A}$ , чем только  $m\mathbf{v}$ . В обсужденном выше случае вектор  $e\mathbf{A}$  антипараллелен вектору  $m\mathbf{v}$  и по длине составляет его половину. Для положительно заряженной частицы он вращается против часовой стрелки по орбите радиуса  $r$ , который определяется из условия  $m\mathbf{v} = eB\mathbf{r}$ . В свою очередь, вектор потенциала вращается по часовой стрелке и имеет длину  $\frac{1}{2}B\mathbf{r}$ .



Поскольку добавление к вектору  $\mathbf{A}$  величины  $\nabla\beta$  (где  $\beta$  — произвольная дифференцируемая скалярная функция  $\mathbf{r}$ ) не меняет ротора  $\mathbf{A}$ , а следовательно, и вектора  $\mathbf{B}$ , локальная длина волны де Бройля может быть произвольной. Это не влияет на квантование орбит, так как полное изменение фазы на орбите остается постоянным. Два способа выбора вектора  $\mathbf{A}$ , которые обсуждались в связи с соотношением (15.19), являются иллюстрацией этого положения.

Точное описание движения электронов в металле под воздействием поля  $\mathbf{B}$  зависит также от вклада, вносимого вектором  $\mathbf{A}$  в значение фазы. Если периодическое поле решетки очень слабое, то электроны движутся почти во всех направлениях, едва «замечая»

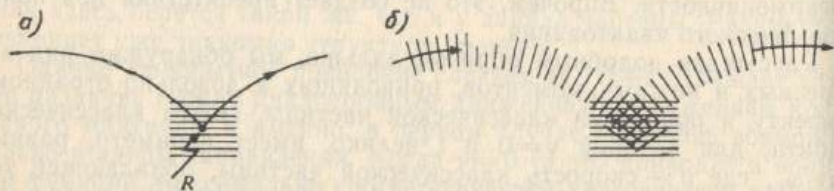


Рис. 15.3. Движущийся в однородном магнитном поле электрон (а) испытывает в точке  $R$  брэгговское отражение от плоскостей решетки, показанных горизонтальными линиями. Схематичное, но не корректное (см. текст) представление брэгговского отражения в магнитном поле (б)

его существование. Но это поле может сыграть значительную роль, если возникает отражение Брэгга. Для того чтобы оно возникло, в периодическом поле решетки должна содержаться Фурье-компонента с таким волновым числом  $\mathbf{g}$ , что электрон с волновым числом  $\mathbf{k}$  после отражения может оказаться в состоянии с тем же значением энергии и волновым числом  $\mathbf{k} + \mathbf{g}$ . Как и при дифракции рентгеновских лучей, стандартным подходом, позволяющим удовлетворить условиям Брэгга, в таком случае является приравнивание модулей векторов  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k} + \mathbf{g}$ . Однако это не является основным требованием. Здесь у нас особый случай, для которого требуется более общая формулировка закона Брэгга.

Электрон на протяжении своей орбиты может испытать отражение от одного набора плоскостей решетки и попасть в область другого набора, ориентированного иначе, чем первый (рис. 15.3). При определенных условиях одного или нескольких последующих отражений может оказаться достаточно, чтобы вернуть электрон на первоначальную орбиту. (Похожий пример приводится на рис. 15.6.)

Параллельно с нашим обсуждением волновых функций локализованных орбит можно вообразить себе квантово-механическую картину, подобную той, что представлена на рис. 15.3, б. Брэгговское отражение воздействует на волновой фронт, размеры которого

хотя и ограничены, но все же значительно превышают период решетки. Такая точка зрения не встречает больших возражений, за исключением того, что представление радиальными обоими наборами волновых фронтов является неверным. Она равносильна предположению о нормированном характере орбит с центрами калибровки, совпадающими с центрами кривизны\*, тогда как на практике следовало бы выбирать один и тот же общий центр калибровки. Это вынуждает нас сформулировать правило, которому подчиняется изменение фазы на орбите, калиброванной относительно точки, не совпадающей с центром кривизны.

Если функция  $\psi_0$  представляет собой решение уравнения (15.17) для заданного значения  $E$ , то добавление  $\nabla\beta$  к векторному потенциалу  $\mathbf{A}$  может быть компенсировано заменой функции  $\psi_0$  на  $\psi_0 e^{ie\beta/\hbar}$ . Нетрудно проверить, что эта функция является решением для того же значения  $E$ . Если теперь представить  $\psi_0$  в виде  $f(\mathbf{r})e^{ie\theta(\mathbf{r})}$ , где  $f(\mathbf{r})$  — действительная функция, то изменение калибровки должно влиять на фазовую постоянную, не вызывая изменения амплитуды, поскольку новое решение имеет вид  $f(\mathbf{r})e^{ie(\theta+\beta)/\hbar}$ .

Этот результат можно выразить по-другому, с помощью локального волнового числа  $\mathbf{k}$ , определенного как градиент фазы. Первоначально  $\mathbf{k}_0 = \nabla\theta$ . Изменение калибровки приводит к переходу  $\mathbf{k}_0$  в  $\mathbf{k}_0 + e\nabla\beta/\hbar$  или в  $\mathbf{k}_0 + e\Delta\mathbf{A}/\hbar$ , где  $\Delta\mathbf{A}$  — изменение потенциала  $\mathbf{A}$  в рассматриваемой точке. Важность этого заключения немедленно выявляется, если обратиться к волновой функции, которая представляет собой локальную плоскую волну  $e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}$  и описывает частицу с импульсом  $\hbar\mathbf{k}_0$ . В этом случае импульс не равен  $m\mathbf{v}$ , а является сопряженным вектором, т. е.  $\hbar\mathbf{k}_0 = m\mathbf{v} + e\mathbf{A}$ . Одновременное добавление  $\Delta\mathbf{A}$  к  $\mathbf{A}$  и  $e\Delta\mathbf{A}/\hbar$  к  $\mathbf{k}_0$  не меняет импульса  $m\mathbf{v}$ . Поэтому то же самое динамическое поведение может быть описано и с помощью нового представления.

В частном случае, когда центр калибровки сдвигается из начала в точку  $\mathbf{R}$ ,  $\Delta\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times (\mathbf{r} - \mathbf{R}) - \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r} = -\frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{R}$ . Эта величина является постоянной. Поэтому все  $\mathbf{k}_0$  возрастают на  $-\frac{1}{2}e\mathbf{B} \times \mathbf{R}/\hbar$ . Для произвольной орбиты с центром в начале координат вектор  $\mathbf{k}_0$  в точке  $\mathbf{r}$  сначала равен  $e\mathbf{r} \times \mathbf{B}/(2\hbar)$ . Если центр калибровки смещается на  $\mathbf{r}$ , то приращение вектора  $\mathbf{k}_0$  оказывается равным  $\mathbf{k}_0$ . Поэтому теперь  $\mathbf{k}_0 = e\mathbf{r} \times \mathbf{B}/\hbar$ . Эта величина в точности равна  $m\mathbf{v}/\hbar$ , как если бы магнитное поле отсутствовало. Но сказанное справедливо лишь для той точки на орбите, которая является центром калибровки. На противоположном конце диаметра  $\mathbf{k}$  уменьшается до нуля. Безусловно, интеграл  $\oint \mathbf{k} \cdot d\mathbf{r}$  по орбите не зависит от калибровочных изменений, поскольку  $\oint \Delta\mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = 0$ .

\* Если вектор  $\mathbf{A}$  записать как  $\frac{1}{2}\mathbf{B} \times (\mathbf{r} - \mathbf{R})$ , то  $\mathbf{R}$  определяет положение центра калибровки, вокруг которого вращается вектор  $\mathbf{A}$ .



Теперь ясно, что условия брэгговского отражения при появлении поля  $\mathbf{B}$  в основном не меняются: если выбрать в качестве центра калибровки точку отражения ( $R$  на рис. 15.3,  $a$ ), то локальное волновое число каждой орбиты определяется величиной  $mv$ , как если бы никакого поля не было. Отражение произойдет, если электрон будет двигаться по орбите в том же направлении, при котором произошло бы отражение в отсутствие поля  $\mathbf{B}=0$ . Естественно, этот результат не зависит от выбора начала отсчета, поскольку смещение последнего на  $\mathbf{R}'$  приводит к появлению одного и того же векторного приращения волновых чисел на обеих орбитах. Разность между ними остается равной  $g$ , что бы ни происходило с каждым из них в отдельности.

#### 15.4. КВАНТОВАНИЕ НЕКРУГОВЫХ ОРБИТ В РЕАЛЬНЫХ МЕТАЛЛАХ

С изложенных позиций можно вычислить фазовую длину на орбите, состоящей из ряда дуг окружности, объединенных брэгговскими рассеяниями, и, следовательно, вывести правило квантования. Его удобнее сформулировать через площадь, ограниченную орбитой, чем через ее периметр. Тщательного изложения соображений здесь мы не будем приводить [3, 4]. Достаточно отметить, что все сказанное ниже хорошо согласуется с более ранним исследованием Онзагера [5] — очень изящным и немногословным, в котором с помощью возврата к полуклассическому методу фазоинтегрального квантования удается обойти наиболее громоздкие проблемы.

Читатель уже видел, к каким хорошим результатам приводит квазиклассическое приближение в случае осцилляторов с высокой ангармоничностью. Равный успех ожидает применение этого метода к циклотронным орбитам электронов, даже если они движутся в настолько сильных полях решетки, что предположение о почти свободном движении в промежутках между брэгговскими отражениями становится неправомерным.

Онзагер предположил, что электрон можно рассматривать как классическую частицу, находящуюся на строго определенной орбите с несколько измененными динамическими свойствами. До известной степени, хотя и далеко не строго, это было подтверждено более поздними работами [6]. В отсутствие магнитного поля энергия считается функцией (возможно, очень сложной) импульса  $\mathbf{p}$ . Запись  $E=E(\mathbf{p})$  представляет собой обобщение ньютоновской формулы  $E=p^2/(2m)$ . Для изображения этой функции в трехмерном  $\mathbf{p}$ -пространстве используют поверхности постоянных значений  $E$ . В реальных металлах эти энергетические поверхности, как правило, очень отличаются от концентрических сфер, описывающих ньютоновскую частицу. Частный случай, показанный на рис. 15.4, иллюстрирует необходимость особого подхода к этому вопросу, подхода, который не очень сильно зависел бы от упрощенных аналитических представлений.

Аналогом волны де Бройля, связанной с частицей, имеющей импульс  $\mathbf{p}$  и волновое число  $\mathbf{k}=\mathbf{p}/\hbar$ , является волна Блоха, которой также можно приписать волновое число  $\mathbf{k}$ . Таким образом, если изменить масштаб, то поверхности  $E(\mathbf{p})$  становятся поверхностями  $E(\mathbf{k})$ . В действительности смысл  $\mathbf{k}$  для волны Блоха гораздо яснее смысла  $\mathbf{p}$ . Поэтому обычно принято пользоваться величиной  $\mathbf{k}$ , а не  $\mathbf{p}$ . Но следует помнить, что, хотя при наложении магнитного поля функция  $E(\mathbf{k})$  все еще определяет энергию, вектор  $\mathbf{k}$  уже более не определяет локальное волновое число, которое теперь необходимо принять равным  $\mathbf{k} + e\mathbf{A}/\hbar$ . Тем не менее это не касается групповой скорости, которая все еще остается такой же, как и у волны с частотой  $\omega=E(\mathbf{k})/\hbar$ , и служит для определения скорости  $\mathbf{v}$  частицы в состоянии  $\mathbf{k}$ . Для одномерного движения групповая скорость равна  $d\omega/dk$ , т. е.  $(dE/dk)\hbar$ . То же самое справедливо для любой компоненты трехмерной скорости. Поэтому в декартовых координатах  $\mathbf{v}$  имеет вид  $\hbar^{-1}(\partial E/\partial k_x, \partial E/\partial k_y, \partial E/\partial k_z)$ , т. е.  $\mathbf{v}=\hbar^{-1}\nabla_{\mathbf{k}}E$ , где  $\nabla_{\mathbf{k}}$  — векторная производная (градиент) в  $\mathbf{k}$ -пространстве. Составляющая  $\nabla_{\mathbf{k}}E$ , лежащая на поверхностях постоянной энергии, отсутствует. Поэтому  $\mathbf{v}$  перпендикулярно этим поверхностям, а модуль  $v$  изменяется обратно пропорционально расстоянию между соседними поверхностями  $E$  и  $E+\delta E$ .

Классическое уравнение движения электрона под действием силы Лоренца в однородном магнитном поле  $\mathbf{B}$  имеет вид

$$\dot{\mathbf{p}}=e\mathbf{v}\times\mathbf{B}.$$

Это соотношение сохраняет силу и при квантовом рассмотрении. Поэтому  $\mathbf{k}$  изменяется в соответствии с уравнением

$$\dot{\mathbf{k}}=(e/\hbar)\mathbf{v}\times\mathbf{B}. \quad (15.23)$$

Все изменения вектора  $\mathbf{k}$  происходят в плоскости, перпендикулярной вектору  $\mathbf{B}$ , который, в свою очередь, перпендикулярен вектору  $\mathbf{v}$ . Это приводит к тому, что точка, представляющая  $\mathbf{k}$  для электрона, движется вокруг какой-либо поверхности постоянной энергии.

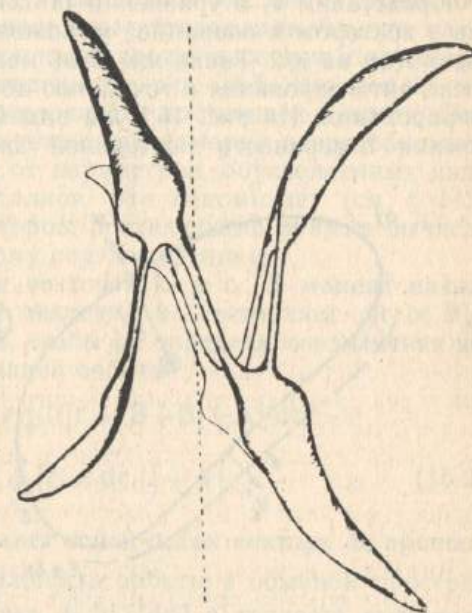


Рис. 15.4. Поверхности Ферми для молибдена, рассчитанные Лио и Фаликовым [7]



Если рассеять эту поверхность плоскостью, перпендикулярной вектору  $\mathbf{B}$ , то получившаяся кривая будет представлять собой  $k$ -траекторию электрона. В общем случае компонента вектора  $\mathbf{v}$ , параллельная  $\mathbf{B}$ , существует. Однако мы пренебрежем продольным движением и сосредоточимся на поперечной компоненте  $v_t$ , перпендикулярной вектору  $\mathbf{B}$ .

Представим  $\mathbf{v}_t$  в уравнении (15.23) как  $\dot{\mathbf{r}}_t$ . Тогда вектор  $\mathbf{z}_t$  связан с вектором  $\mathbf{k}$  операцией умножения на  $\hbar/(eB)$  с последующим поворотом на  $\pi/2$ . Такая же связь между векторами  $\mathbf{r}_t$  и  $\mathbf{k}$  остается после интегрирования с точностью до произвольной постоянной интегрирования. Из рис. 15.5 мы видим, что если в результате рассеяния поверхности постоянной энергии получается замкнутая

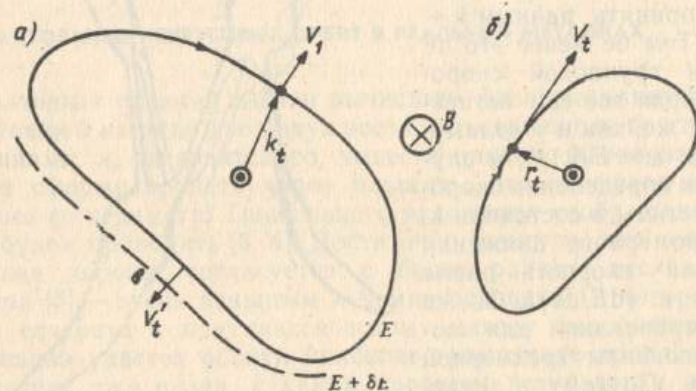


Рис. 15.5. Движение электрона в однородном магнитном поле: а — в  $k$ -пространстве; б — в реальном пространстве. Кривые подобны, но повернуты на угол  $90^\circ$  по отношению друг к другу

кривая, то электрон, вектор  $\mathbf{k}$  которого движется вдоль нее, в реальном пространстве описывает аналогичную замкнутую кривую. Размер этой орбиты обратно пропорционален напряженности магнитного поля, а ориентация произвольна. Строго говоря, если учитывать движение вдоль вектора  $\mathbf{B}$ , то эта орбита представляет собой проекцию на плоскость, нормальную к  $\mathbf{B}$ , неравномерной спиральной траектории, которая каждый раз в точности повторяется.

Циклотронная частота  $\omega_c$  для произвольной орбиты может быть выражена через геометрические величины посредством вычисления времени, необходимого для прохождения кольцеобразной области, лежащей между двумя соседними сечениями  $E$  и  $E - \delta E$  (рис. 15.5). Согласно уравнению (15.23), типичная точка и соответствующий ей вектор  $\mathbf{v}'_t$  пробегает область со скоростью  $\dot{\mathbf{r}}_t = eB\mathbf{v}'_t/\hbar$ . Ширина кольца составляет  $\delta E/(\hbar v'_t)$ . Поэтому кольцеобразная область очерчивается с постоянной скоростью  $eB\delta E/\hbar^2$ . Если площадь сечения поверхности постоянной энергии равна  $\mathcal{A}_k(E)$ , то кольцо име-

ет площадь  $d\mathcal{A}_k/dE \cdot \delta E$  и пробегается за время  $[\hbar^2/(eB)]d\mathcal{A}_k/dE$ . Следовательно,

$$\omega_c = (2\pi eB/\hbar^2)/(d\mathcal{A}_k/dE). \quad (15.24)$$

Для случая, когда свободные электроны движутся в плоскости, перпендикулярной  $\mathbf{B}$ , имеем  $E = \hbar^2 k^2/(2m)$ , так что  $\mathcal{A}_k = 2\pi m E/\hbar^2$  и из соотношения (15.24) получаем  $\omega_c = eB/m$ , что и ожидалось. Если квантованные уровни разделены интервалами  $\hbar\omega_c$ , то на  $k_t$ -плоскости они образуют совокупность вложенных друг в друга кривых, подобных тем, что приведены на рис. 15.5. Каждая из них представляет собой сечение поверхности постоянной энергии. Площади, заключенные внутри кривых, равномерно возрастают порциями по  $2\pi eB/\hbar$  независимо от параметров, обусловленных индивидуальными свойствами металлов. Это напоминает (см. § 14.2) фазовый интеграл для вибраторов, последующие прямые вычисления этого интеграла явятся тому подтверждением.

Выберем начальные точки векторов  $\mathbf{k}_t$  и  $\mathbf{r}_t$ . В момент нахождения электрона в точке  $\mathbf{r}_t$  значение  $\mathbf{k}_t$  составляет  $e[\mathbf{r}_t \times \mathbf{B}]/\hbar$ . К этому нужно добавить  $e\mathbf{A}/\hbar$ , чтобы  $\mathbf{k}'_t$  определяло изменения фазы. Следовательно, фазовая длина орбиты

$$\begin{aligned} J &= \hbar \oint (\mathbf{k}'_t \cdot d\mathbf{r}_t) = e \oint ((\mathbf{r}_t \times \mathbf{B} + \mathbf{B}) + \mathbf{A}) \cdot d\mathbf{r}_t = \\ &= e \{ (-\mathbf{B} \cdot \oint [\mathbf{r}_t \times d\mathbf{r}_t]) + \Phi \}, \end{aligned} \quad (15.25)$$

где  $\Phi = \oint (\mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}_t)$  представляет собой поток вектора  $\mathbf{B}$ , пронизывающий орбиту. Если  $\mathcal{A}_r$  — площадь орбиты в обычном пространстве, то  $\Phi = B\mathcal{A}_r$ . Заметим, что  $\oint [\mathbf{r}_t \times d\mathbf{r}_t]$  в точности составляет  $2\mathcal{A}_r$ . Таким образом, первое слагаемое в (15.25) в два раза больше второго и

$$J = -eB\mathcal{A}_r. \quad (15.26)$$

Тогда последующее применение правила квантования (14.12) позволяет получить допустимые значения  $\mathcal{A}_r$ :

$$\mathcal{A}_r = (n + \gamma) 2\pi \hbar/(eB). \quad (15.27)$$

Допустимые значения площади  $\mathcal{A}_r$  в обычном пространстве возрастают равными порциями  $2\pi \hbar/(eB)$ . Допустимые значения  $\mathcal{A}_k$  возрастают ступеньками, соответственно в  $(eB/\hbar)^2$  раз большими, т. е.  $2\pi eB/\hbar$ , для обеспечения в соответствии с (15.24) энергетических интервалов  $\hbar\omega_c$ . Разрешенными орбитами в обычном пространстве являются те, для которых охватываемый поток составляет  $(n + \gamma) 2\pi \hbar/e$ .

Иногда порцию потока  $2\pi \hbar/e$  рассматривают как квант потока. Во многих отношениях эта величина ведет себя соответствующим образом: в том случае, если удастся выделить пучок линий потока, применение условий квантования к системе, для которой это выде-



ление возможно, весьма напоминает такое требование: величина  $\Phi$  должна быть интегралом, кратным  $2\pi\hbar/e$ . Самый простой путь выделения из общей массы  $\Phi$  состоит в заключении потока в сверхпроводящее кольцо. Но в этом случае интеграл кратен половине кванта  $\pi\hbar/e$ . Поэтому концепция о кванте потока требует осторожного обращения: квант потока не совсем обычный квант.

Онзагеровская демонстрация квантования циклотронных орбит только через их площади независимо от формы имела глубокие последствия для изучения металлов. Эффект Хааз-ван-Альфена [8], основная суть которого состоит в периодических изменениях намагниченности металлического монокристалла при низкой температуре, является прямым следствием квантования орбиты. Измеряя период этих изменений, можно с большой точностью определить площади некоторых основных сечений поверхности Ферми (поверхности постоянной энергии, которая отделяет заполненные состояния от незаполненных). Изменяя направление  $\mathbf{B}$ , можно изучать и другие сечения.

Информация, накопленная в достаточном объеме для многих металлов [9], позволяет воспроизвести детальную форму поверхностей Ферми (например, рис. 15.4). Это первый шаг на пути уточнения динамических свойств электронов проводимости. Наградой за систематические исследования стал большой прогресс в познании поведения металлов. Позднее, произведя огромные вычисления, из исходных предположений удалось получить количественные соотношения для поверхностей Ферми в разных металлах.

Решение уравнения Шредингера для электронов, движущихся в потенциале ионной решетки, оказывается слишком трудным, если не использовать аппроксимации или не прибегать к упрощенным моделям вместо реально существующих ионных потенциалов. Результаты, полученные заранее на таких моделях, позволяют оценить и стереть точность теоретических упрощений, с помощью которых методы аппроксимации затем можно уверенно применять к более современным задачам, прямое экспериментальное подтверждение которых весьма затруднено.

### 15.5. МАГНИТНОЕ РАЗРУШЕНИЕ [10]

Периодическое поле ионной решетки, в котором движутся электроны проводимости, влияет не только на форму их орбит. Оно вызывает существенные изменения в природе орбит, например изменения их направлений на противоположные. Приведенная на рис. 15.6 гексагональная двумерная модель иллюстрирует сказанное. Если потенциалом решетки можно пренебречь, то любая из показанных круговых орбит является одной из множества разрешенных орбит свободных электронов с произвольно расположенными центрами. Однако по мере увеличения потенциала для рассмотрения удобно использовать (как это и сделано на рисунке) подмножество, выбранное таким образом, чтобы во всех пересечениях, и

только в них, удовлетворялось условие Брэгга. Тогда электроны не смогут завершать свои круговые орбиты, но вместо этого в зависимости от того, откуда они стартовали, электроны смогут либо пробегать малые треугольные орбиты ( $T'$ ) в том же направлении, либо большие гексагональные орбиты ( $H'$ ) в обратном направлении. Онзагеровское правило квантования (15.27) определяет, при каких энергиях электронов какие орбиты оказываются разрешенными. Можно отметить, что для магнитного поля заданной напряженности орбиты всех свободных электронов, связанных брэгговским отражением, определяются одной и той же решеткой, составленной из центров орбит для всех энергий\*.

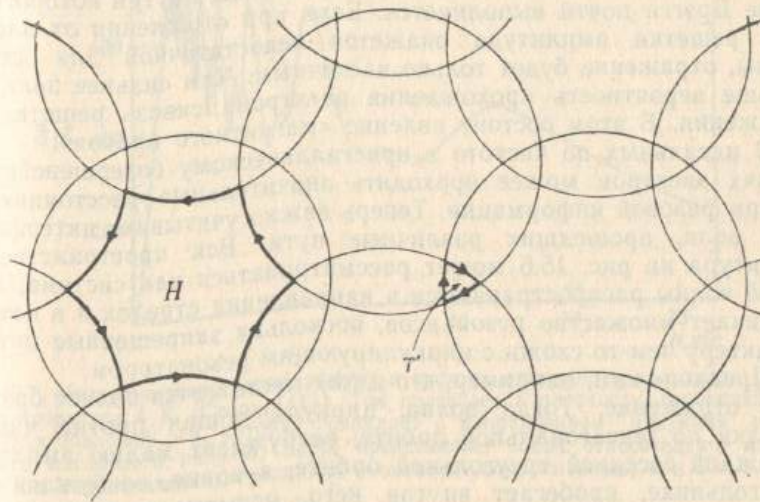


Рис. 15.6. Орбиты свободного электрона, который испытывает брэгговское отражение от гексагональной решетки. Орбиты образуют сетку возможных переходов при магнитном разрушении

По мере возрастания  $E$  и увеличения диаметров окружностей треугольные орбиты расширяются, тогда как гексагональные — сжимаются. В этом случае разрешенные энергетические уровни распадаются на два множества. Так как площади нелинейно зависят от энергии, нарушается эквидистантность, которая свойственна уровням свободных электронов. С ростом  $B$  уровни  $T'$  движутся вверх по значениям энергии, тогда как уровни  $H'$  движутся вниз.

После этих кратких предварительных замечаний зададим себе вопрос: как осуществляются переходы электронов со свободных орбит на орбиты  $T'$  и  $H'$  по мере роста потенциала решетки? В принципе ответ прост: брэгговское отражение не является пол-

\* Решетка из центров орбит подобна обратной решетке, но имеет шаг  $\hbar/(eB)$ .



ным, при каждом переходе существует некоторая вероятность отражения электрона. Если оно не состоится, то электрон движется по орбите свободного электрона до следующего перехода, где перед ним возникнет тот же выбор. Процесс брэгговского отражения можно представить себе как образование слабой волны при отражении падающей волны на каждой плоскости решетки. При определенном значении угла падения все слабые отраженные волны складываются в одинаковой фазе и дают сильную результирующую волну. В самом деле, если падающая волна не отклонена магнитным полем, отражение является полным для углов падения, лежащих в узком интервале вокруг угла Брэгга. Но магнитное поле, искривляя траектории, ограничивает интервал, внутри которого условие Брэгга почти выполняется. Если при отражении от плоскостей решетки амплитуда окажется недостаточной для данной длины, отражение будет только частичным. Чем сильнее поле, тем больше вероятность прохождения электрона сквозь решетку без отражения. В этом состоит явление «магнитного пробоя».

В идеальных по чистоте и кристаллическому совершенству условиях электрон может проходить значительные расстояния без потери фазовой информации. Теперь важно учитывать интерференцию волн, прошедших различные пути. Вся пространственная структура на рис. 15.6 может рассматриваться как система, в которой волны распространяются в направлении стрелок и в которой возникает множество резонансов, поскольку запрещенные пути по характеру чем-то схожи с циркулирующим резонатором.

Предположим, например, что имеет место почти полное брэгговское отражение. Тогда волна, циркулирующая против часовой стрелки по гексагональной орбите, возбуждает малую амплитуду в каждой соседней треугольной орбите, а волна, возбужденная в треугольнике, пробегает внутри него, испытывая лишь слабую утечку в соседние с ним шестиугольники. Если фазовая длина треугольника в точности кратна  $2\pi$ , возникает резонанс: колебания слабой амплитуды, введенные из шестиугольника начинают заметно выкачивание и перенос энергии на другие соседние орбиты. Таким образом, электрон, который первоначально считался принадлежащим единственной гексагональной орбите, может найти путь на другие орбиты. В каком-то смысле дальше он продолжает диффузионное движение по всему металлу. Так как это явление зависит от энергии электрона, соответствующей одному из разрешенных уровней для треугольных орбит (в данном контексте это составляет смысл резонанса), то допустимая для электрона траектория при некоторых значениях напряженности магнитного поля может оказаться тесно связанной с какой-либо орбитой, подобной  $H$ . При других значениях напряженности возможны значительные отклонения в отдаленные области. В результате проводимость металла, которая определяется тем, как далеко и в каком направлении может перемещаться электрон, быстро осциллирует вслед за

напряженностью магнитного поля, что и показано на рис. 15.7.

Явление магнитного пробоя не является чем-то необычным для металлов. Во многих случаях брэгговское отражение настолько слабо, что пробой оказывается возможным при экспериментально доступных магнитных полях. Подробности того, что при этом происходит, сильно зависят от относительного расположения связанных орбит, поэтому так мало общих правил и выявлено при анализе особых случаев.

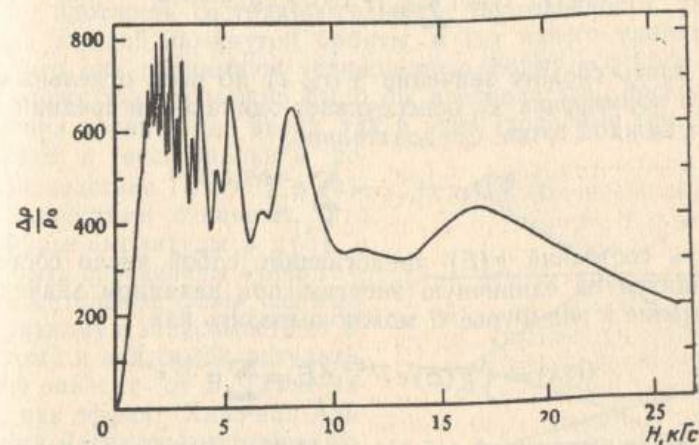


Рис. 15.7. Магнитно-резистивный эффект в чистом одиночном кристалле цинка при температуре 4 К (Старк [11]). Ток протекает в плоскости, перпендикулярной гексагональной оси, которая совпадает с направлением индукции приложенного магнитного поля  $B$ ;  $\Delta\rho/\rho_0$  представляет собой относительное изменение сопротивления образца;  $\rho_0$  — значение сопротивления при  $B=0$

Однако один общий результат представляет некоторый интерес, причем не только в связи с магнитным пробоем, поскольку он связан с точкой зрения, которую можно использовать и в других случаях. Мы уже видели, что, когда циклотронные орбиты определены точно, разрешенные энергетические уровни образуют дискретную лестницу. Однако из-за магнитного пробоя уровни расползаются, образуя нечто, скорее похожее на континуум, хотя интервалы между уровнями все еще возможны.

Теорема, доказанная Фаликовым и Стаховиаком [12], дает ключ к расшифровке диаграммы энергетических уровней. Пусть в момент времени  $t=0$  в точку  $\mathbf{r}_0$  в металле помещен волновой пакет и пусть этот пакет идеально мал:  $\Psi(\mathbf{r}_0, 0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ . Он незамедлительно начинает расширяться. Этот процесс можно формально записать, выразив  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$  суммой Фурье по всем стационарным состояниям электрона в магнитном поле:

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \sum_n \psi_n^*(\mathbf{r}_0) \psi_n(\mathbf{r}), \quad (15.28)$$



так как амплитуда  $n$ -й волновой функции просто равна  $\Psi_n^*(\mathbf{r}_0)$ . Поэтому в момент  $t$  развитие каждой волновой функции приводит к росту результирующей:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n \psi_n^*(\mathbf{r}_0) \psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (15.29)$$

В частности, в точке  $\mathbf{r}_0$ , из которой стартовал волновой пакет,

$$\Psi(\mathbf{r}_0, t) = \sum_n \psi_n^*(\mathbf{r}_0) \psi_n(\mathbf{r}_0) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (15.30)$$

Если взять среднее значение  $\Psi(\mathbf{r}_0, t)$  по всем отдельным точкам  $\mathbf{r}_0$ , то нормировка  $\Psi_n$  обеспечивает одинаковый средний вклад  $\Psi_n^* \Psi_n$  от каждой точки. Следовательно,

$$\langle \Psi(\mathbf{r}_0, t) \rangle \sim \sum_n e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (15.31)$$

Плотность состояний  $g(E)$  представляет собой число состояний, приходящихся на единичную энергию при заданном значении  $E$ , а разложение в ряд Фурье  $G$  можно выразить как

$$G(x) = \int g(E) e^{-iEx} dE = \sum_n e^{-iE_n x}. \quad (15.32)$$

Сравнение выражений (15.31) и (15.32) показывает, что временное разложение  $\Psi(\mathbf{r}_0, t)$  при Фурье-анализе приводит к плотности состояний.

В этом кратком резюме сглажено несколько тонких трудностей. Однако высказанного достаточно для качественного обсуждения. Что же касается деталей, то их можно найти в оригинальных работах.

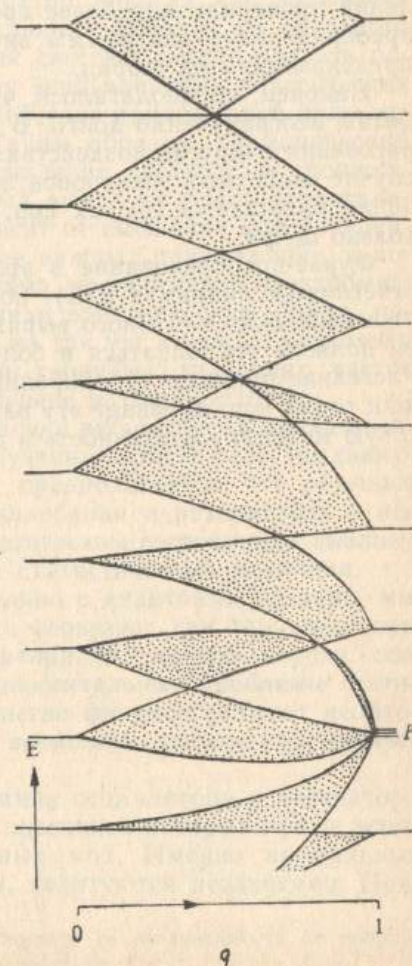
Для иллюстрации сказанного воспользуемся свободным электроном. Первоначальный волновой пакет расплывается по всем направлениям так, будто в точке  $\mathbf{r}_0$  имеется скопление классических электронов. Неважно, каково исходное направление их движения, они все вернутся в  $\mathbf{r}_0$  после одного циклотронного периода. Можно ожидать, что после восстановления волновая функция даст острый пик только для того, чтобы снова расплзтись, а затем через такой же промежуток времени опять восстановиться. Следовательно,  $\langle \Psi(\mathbf{r}_0, t) \rangle$  представляет собой последовательность пульсаций с периодом  $2\pi/\omega_c$ , а разложение этой функции в ряд Фурье дает четкий набор линий:

$$g(E) \sim \int \Psi(\mathbf{r}_0, t) e^{iEt/\hbar} dt \sim \sum_v e^{ivE/\hbar\omega_c} \sim \sum_n \delta(E - n\hbar\omega_c).$$

Если не касаться относительной поправки  $\gamma$ , которая была потеряна в этом исследовании, то полученный результат и есть желаемое квантование уровней, разнесенных на  $\hbar\omega_c$ .

Если приведенное рассуждение применить к пробую решетки, показанной на рис. 15.6, то вид функции  $\Psi(\mathbf{r}_0, t)$  становится более сложным, хотя все еще можно ожидать, что она аппроксимируется последовательностью импульсов. Однако теперь импульсы уже не образуют простой регулярной последовательности, а появляются в такие моменты времени, которые допускаются каким-либо из запрещенных проходов через решетку, и с такими амплитудами, которые определены вероятностями отражения от каждого узла. Поэтому плотность состояний содержит периодичности, характерные для каждой замкнутой орбиты, и нет ничего удивительного в том, что они принимают усложненную форму — форму гораздо более сложную, чем можно было бы предполагать, поскольку перемещения уровней как вверх, так и вниз (подобные тем, которые возникают в гексагональной решетке вследствие  $T'$  и  $H'$ ) с разными скоростями означают, что эти Фурье-амплитуды в  $g(E)$  и могут быть определены очень точно, относительные фазы меняются по-разному в зависимости от  $B$ . А поэтому и вид самой результирующей зависит от  $B$ . Такие явления, как эффект Хааз-ван-Альмена или магниторезистивные колебания, обусловлены Фурье-амплитудами в большей мере, чем

Рис. 15.8. Теоретическая структура энергетических уровней для системы, изображенной на рис. 15.6 [3]. Справа показаны равномерно распределенные узкие уровни, возникшие в результате сильного брэгговского отражения, определяемого величиной  $g$ , и связанные с гексагональной орбитой  $H'$ , со вторичным набором более широких уровней, имеющих двойное вырождение, обусловленное треугольными орбитами  $T'$ . В  $A$  окрестности точки  $P$  уровни, связанные с  $H'$  и  $T'$ , совмещены. Слева показаны узкие уровни, характерные для свободных электронов, когда потенциальная решетка уменьшена настолько, что магнитное разрушение становится полным. Середина рисунка характерна для случая, когда имеют место частичное отражение и частичный переход каждого узла сетки и уровни размываются, превращаясь в полосу, обусловленные связыванием орбит





фазами, и необычное (в действительности прерывистое) изменение  $g(E)$  как функции  $B$  имеет мало (если имеет их вообще) экспериментальных последствий. Тем не менее полезно отметить как явление природы то разнообразие, которое порождается соединением орбит в протяженную решетку.

В качестве иллюстрации простейшей формы  $g(E)$ , т. е. такой, при которой для удобства вычислений  $B$  имеет значение, достаточное для наблюдения эффекта, на рис. 15.8 показано, как сперва дискретная структура уровней, вызванная  $H'$  и  $T'$  (правая часть рисунка), по мере уменьшения потенциала решетки и начала магнитного пробоя начинает растекаться в полосы. В конце концов, когда потенциал решетки полностью устранен, полосы снова распадаются на дискретные уровни свободных электронов (левая часть рисунка). Фаликов и Стаховиак посредством прямых вычислений проверили для более простого случая тот факт, что Фурье-преобразование диаграммы энергетических уровней соответствует предсказаниям их теории.

Наконец, предполагалось, что электроны следуют по своим орбитам неограниченно долго. В действительности они претерпевают рассеяния и другие воздействия. В результате даже в простейшем случае свободных электронов последовательность пульсаций постепенно нарушается до тех пор, пока в  $\langle \Psi(r_0, t) \rangle$  не останутся только шумы.

Фурье-преобразование в этом примере не может приводить к отчетливым линиям в  $g(E)$ : поскольку в последовательности имеется несколько или много выраженных импульсов, отдельные уровни должны расплываться в более или менее диффузные пятна. Рассеяние приводит к уширению энергетических уровней. Следующая глава подхватывает эту важную тему, которая вводит в квантовую механику хаотичность и диссипацию.

## 10. ДИССИПАЦИЯ, УШИРЕНИЕ УРОВНЕЙ И ИЗЛУЧЕНИЕ

Теперь, сделав экскурс в область нелинейных вибраторов, вернемся к гармоническому осциллятору и рассмотрим вопрос с тех позиций, которые начали вырисовываться в конце гл. 13 (см. § 13.11). Было установлено, что под действием однородной\*, произвольно меняющейся во времени силы вибратор никогда «не забывает» своего исходного состояния. Если процесс начался из основного состояния, то в последующем отклик системы можно описать поведением компактного распределения эквивалентных классических вибраторов в  $\sigma$ -представлении. На действие приложенной силы откликается только центр инерции. Таким образом, гармонический вибратор оказывает сильное сопротивление хаотизации процесса. Действительно, только что сделанный вывод не будет справедливым, если сила не однородна, а зависит от смещения колеблющейся частицы. Тем не менее в наиболее важных приложениях, в которых осциллятор в масштабах атома подвергается электромагнитным воздействиям, сила вызванная электрическим полем, почти всегда однородна. Впрочем, это не так уж и важно, поскольку длина электромагнитных волн при типичных значениях частот атомного резонанса в тысячу раз больше размеров атома.

Сделанное замечание о сопротивлении вибратора хаотизации состоит в том, что во всех теориях излучения черного тела (выдвинутых как до, так и после Планка) предполагается, что обычные осцилляторы и электромагнитные колебания в резонаторах в конечном счете оказываются в том хаотическом состоянии, к анализу которого можно применять законы статистической механики.

Рассматривая вопрос исключительно с квантовых позиций, мы обнаружим, что проблема не столь серьезна, как выглядит при тщательном классическом рассмотрении. Во всяком случае, она не более серьезна, чем другие фундаментальные проблемы статистической физики, которые большинство физиков считают необходимым подвергать анализу и, если возможно, решать математическими средствами.

Ниже будут рассмотрены колебания осциллятора и резонатора как пары связанных осцилляторов, поведение которых лучше всего описывается с помощью нормальных мод. Именно нормальные моды, а не отдельные осцилляторы, квантуются независимо. При-

\* Под однородностью силы будем понимать ее независимость от координаты.



знание этого факта не только разрешает непосредственные трудности, но и естественно ведет к рассмотрению энергетического обмена между осцилляторами и резонаторами с квантово-механических позиций, т. е. к рассмотрению атомных процессов, связанных с электромагнитным излучением и поглощением. В данной главе будет проведено лишь предварительное рассмотрение проблемы преимущественно с классических позиций, где излучение и поглощение описываются сравнительно легко. Позднее эти вопросы будут подняты вновь, но уже с иных позиций.

#### 16.1. СВЯЗАННЫЕ ГАРМОНИЧЕСКИЕ ВИБРАТОРЫ

Для предстоящего рассмотрения не требуется глубокого понимания природы и знания типов электромагнитных колебаний в резонаторах. Достаточно признать,

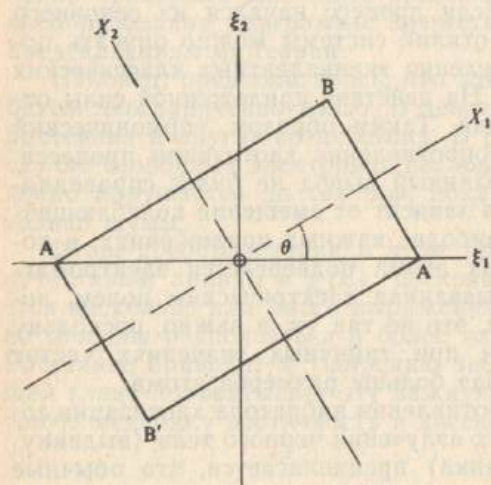


Рис. 16.1. Координаты, использованные для описания нормальных мод двух связанных гармонических осцилляторов (ср. с рис. 12.3);  $\xi_1$  и  $\xi_2$  — координаты отдельных вибраторов. В случае связывания нормальные моды представляют собой независимые гармонические колебания с различными частотами вдоль  $x_1$  и  $x_2$

что в большом резонаторе с идеально проводящими стенками можно возбудить резонансные колебания с очень большим числом частот с помощью колеблющегося диполя, помещенного внутрь резонатора. Каждая резонансная мода имеет характерный вид пучностей и узлов, и для каждой моды напряженность электрического поля  $E$  в какой-либо заданной точке может служить для определения напряженности электрического поля повсеместно. Таким образом, для описания поведения резонатора достаточно одного параметра, аналогичного смещению  $x$  для гармонического осциллятора; при этом магнитное поле  $B$  также будет определяться единственным параметром, играющим роль, аналогичную  $\dot{x}$ . Так как энергия в резонаторе для любого момента времени равна интегралу по объему от плотности энергии  $1/2\epsilon_0 E^2 + 1/2 B^2/\mu_0$ , то ее можно записать в форме, которая в точности соответствует энергии  $1/2\mu\dot{x}^2 + 1/2 m\dot{x}^2$  обычного (материального) осциллятора. Тогда уравнение Шредингера для моды в резонаторе принимает вид (13.1). Если  $\xi$  задать подходящим образом, то уравнение можно записать в приведенном виде (13.2). Потенциальная энергия для резонатора совпадает с  $1/2\xi^2$  — потенциальной

энергией обычного осциллятора, кинетическая — с кинетической  $1/2\dot{\xi}^2$ , т. е.  $1/2(d\xi/dt)^2$ . Поэтому энергия резонатора, обусловленная электрическим полем, равна  $1/2\xi^2$ , а обусловленная магнитным полем —  $1/2\dot{\xi}^2$ . В случае свободных колебаний в резонаторе между этими двумя формами дважды за период происходит такой же взаимный обмен, как и для гармонического осциллятора, когда его энергия поочередно принимает форму то потенциальной, то кинетической энергии.

Осциллирующий диполь, помещенный в какую-либо точку внутри резонатора, в которой на его момент  $p$  действует электрическое поле  $E$  в этой точке, оказывается связанным с модой резонатора энергией связи  $p \cdot E$ . Она пропорциональна  $\xi_1 \cdot \xi_2$ , если  $\xi_2$  — мера электрического поля в резонаторе, а  $\xi_1$  — мера дипольного момента. Вместе диполь и мода ведут себя как пара гармонических вибраторов с потенциальной связью. К такой связанной паре, не вникая в фактическую природу вибраторов, можно применять как классический, так и квантовый анализ.

Нет необходимости повторять классическую теорию связанных гармонических вибраторов, которая была изложена в гл. 12 (см. § 12.1). В случае использования координат  $\xi_1$  и  $\xi_2$ , когда члены  $1/2\dot{\xi}_{1,2}^2$  являются вкладками в кинетическую энергию несвязанных вибраторов, а члены, пропорциональные  $\xi_1, \xi_2$ , — вкладками в потенциальную энергию, основной результат состоит в том, что нормальные моды представляют собой линейные комбинации, получаемые вращением осей в  $(\xi_1, \xi_2)$ -плоскости, как на рис. 16.1, отличающемся от рис. 12.2 только обозначениями.

Формально гамильтониан для обычных связанных вибраторов имеет вид

$$H = p_1^2/(2m_1) + p_2^2/(2m_2) + 1/2 m_1 \omega_1^2 x_1^2 + 1/2 m_2 \omega_2^2 x_2^2 + C x_1 x_2. \quad (16.1)$$

Если  $\omega_1$  и  $\omega_2$  близки, удобно определить  $\xi_{1,2}$  как  $(m_{1,2}\bar{\omega}/\hbar)^{1/2} x_{1,2}$ , а  $\tau$  — как  $\bar{\omega}t$ , где  $\bar{\omega} = 1/2(\omega_1 + \omega_2)$ . Тогда

$$H = 1/2 \hbar \bar{\omega} (\dot{\xi}_1^2 + \dot{\xi}_2^2 + \omega_1^2 \xi_1^2/\bar{\omega}^2 + \omega_2^2 \xi_2^2/\bar{\omega}^2 + 4\kappa \xi_1 \xi_2/\bar{\omega}),$$

где  $\kappa = C/[2\bar{\omega}(m_1 m_2)^{1/2}]$ . Записав  $\xi_1 = X_1 \cos \theta + X_2 \sin \theta$ ,  $\xi_2 = X_2 \cos \theta - X_1 \sin \theta$  таким образом, чтобы

$$\tan 2\theta = 2\kappa/(\omega_2 - \omega_1), \quad (16.2)$$

и исключив перекрестные члены, получим

$$H = 1/2 \hbar \bar{\omega} (\dot{X}_1^2 + \dot{X}_2^2 + \Omega_1^2 X_1^2/\bar{\omega}^2 + \Omega_2^2 X_2^2/\bar{\omega}^2). \quad (16.3)$$

Частоты нормальных мод  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$ , являющиеся решениями этого уравнения, уже получены ранее [см. (12.11)]:

$$(\Omega_{1,2} - \bar{\omega})^2 = \kappa^2 + (\Delta\omega)^2, \quad (16.4)$$



где  $\Delta\omega = 1/2(\omega_1 - \omega_2)$ . Опираясь координатами нормальной моды, можно соответствующее равенству (16.3) уравнение Шредингера преобразовать в уравнение с разделяющимися переменными  $\Psi(X_1 X_2) = \Psi_1(X_1)\Psi_2(X_2)$ , где  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  являются решениями уравнений гармонического осциллятора для частиц той же массы, но находящихся под действием различных постоянных сил.

С другой стороны, выражение (16.3) можно считать гамильтонианом частицы, совершающей плоское движение в анизотропной квадратичной потенциальной яме. Ее свободное движение как классической частицы было бы фигурой Лиссажу с периодом биений  $2\pi/(\Omega_1 - \Omega_2)$ . При квантовом рассмотрении волновые функции — компоненты — вели бы себя, как уже обсуждалось, независимо, в то время как волновой пакет  $\Psi\Psi^*$  описывал бы классическую траекторию Лиссажу.

Теперь видно, как ввести хаотичность. Пусть  $\xi_2$  — координата, описывающая моду резонатора, а  $\xi_1$  — координата связанного с ним диполя. Предположим, что в начале процесса система находится в своем основном состоянии: в начале координат (рис. 16.1) помещен почти круглый гауссовский волновой пакет. Возбуждение диполя импульсным электрическим полем заставляет волновой пакет осциллировать без изменения формы вдоль оси  $\xi_1$ , например между точками  $A$  и  $A'$ . В последующем фигуры Лиссажу заполняют прямоугольник  $ABA'B'$ , а колебания резонатора описываются гауссовским волновым пакетом, огибающая которого медленно меняется с периодом, равным периоду биений. Так что хаотичность пока не появляется.

Далее, вообразим, что диполь, не связанный в данный момент, подвергается возмущению вследствие соударений с молекулами газа. Такие взаимодействия сильно зависят от положения диполя. Разумно предположить, что волновая функция для диполя имеет такой разрыв, что в конечном счете ее лучше описывать как суперпозицию собственных функций, амплитуды и фазы которых произвольны. Если тот же процесс происходит, когда диполь связан с колебаниями резонатора, то хаотизация должна затрагивать и диполь, и резонатор. Для любого возмущения  $\xi_1$ -части нормальной моды волновая функция смешивается с другими волновыми функциями нормальной моды и поэтому изменяется и  $\xi_2$ -часть. Различие между этим новым толкованием, позволяющим ввести хаотичность, которой раньше не было, и старым состоит в сохранении  $X_1$  и  $X_2$  как независимых координат в выражении (16.1), а следовательно, и в уравнении Шредингера. Прежде уравнение для  $X_2$  (или  $\xi_2$ ) содержало  $X_1$  в качестве такой зависимой переменной, что  $X_1(t)$  определяло силу, возмущающую  $X_2$ .

Из изложенного ясно, что недостаточно знать, как изменяются  $\langle X_1 \rangle$  или каково распределение вероятностей для всех возможных изменений  $\langle X_1 \rangle$ . Подобные изменения не могут вызвать хаотизации  $X_2$ . Механизм возникновения беспорядка является в основном неклассическим механизмом.

Проведенное обсуждение служит для того, чтобы отчетливо обозначить границы классического рассмотрения поведения гармонического осциллятора. Как только такой осциллятор вступает во взаимодействие с какими-либо квантовыми системами или даже с другим гармоническим осциллятором, полностью избежать квантового толкования этой связанной системы практически невозможно. Разумеется, данное заключение с тем же успехом можно отнести к соударениям молекул с осциллятором. Мы подразумевали, что самого характера взаимодействия уже достаточно, чтобы привести к хаотичности. В свою очередь, квантовая механика делает это тем более неизбежным.

## 16.2. ДИССИПАЦИЯ И УШИРЕНИЕ УРОВНЕЙ

Предшествующий анализ создал базу для квантово-механического обсуждения поведения вибратора, подверженного диссипации. Цель этого параграфа состоит в разъяснении смысла термина «уширение уровня». В классическом случае вибратор с большим затуханием, откликаясь на действие силы, которая не обязательно должна быть резонансной, приводит к возникновению лоренцевского пика (см. § 6.2). Квантовым аналогом является слабо искаженный энергетический уровень, который допускает появление переходов с испусканием или поглощением кванта с энергией внутри некоторого диапазона значений.

В классической механике нередко допустимо вводить в уравнение движения величину, характеризующую потери, без уточнения их природы. Например, силу трения можно считать не зависящей от скорости без тщательного рассмотрения поверхностных явлений, ответственных за трение. Однако только что обсужденный пример о связанных диполе и моде резонатора показывает, как важно в квантовой механике знать о действии микромеханизмов и учитывать их в случае необходимости при проведении анализа. Однако не существует способа, позволяющего ввести трение скольжения в уравнение Шредингера, поскольку нет соответствующего метода записи уравнения для каждого отдельного атома в задаче многих тел. Поэтому приводимое рассмотрение базируется на реальных моделях диссипации в микромире. Следует различать типы диссипации, а также признать, что не все видимые уширения линий являются результатом диссипации. Последующие три примера поясняют различия:

1. *Частица в потенциальной яме, через стенки которой она может проникать.* В этом случае решение уравнения Шредингера фактически совпадает с решением задачи о линии передачи, в которой резонатор образован двумя реактивными сопротивлениями, присоединенными к концам линии, и допускает слабую утечку за пределы линии стоячей волны, возникающей между этими сопротивлениями. Если скорость потерь невелика, то нет большой раз-



ницы, возникают ли они из-за неполного отражения волны от барьера или из-за поглощения на протяжении всей ямы.

Второй случай грубо воспроизводит связанное состояние нестабильной частицы, при котором она вследствие взаимодействия с окружающими частицами может переходить в состояние, которое в этой задаче мы не рассматриваем. Строго говоря, детали этих процессов нужно включить в исследование, но иногда это оказывается адекватным введению несохранения частицы в модели с комплексным потенциалом.

Частица, движущаяся по участку траектории длиной  $a$  в потенциальном поле  $-iV''$ , формально подчиняется уравнению Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (E + iV'')\psi = 0.$$

Если  $\psi=0$  на обоих концах  $x=0$  и  $x=a$ , то для собственного состояния с номером  $n$ , для которого  $\psi_n = \sin(n\pi x/a)$ , должно выполняться условие  $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/(2ma^2) - iX''$ . Поэтому полная волновая функция  $\Psi_n = \psi_n e^{-iE_n t/\hbar}$  обладает затуханием, пропорциональным  $e^{-V''t/\hbar}$ .

Импульсный отклик этой системы, соответствующий добавлению после импульса других собственных состояний, в общем случае (из-за таких произведений, как  $\Psi_m^* \Psi_n$ ) содержит члены, меняющиеся как  $e^{-i(E_n - E_m^*)t/\hbar}$  и описывающие колебания на частоте биений, однако убывающие как  $e^{-2V''t/\hbar}$ . Соответственно частотный отклик имеет лоренцевский резонанс с полушириной  $2V''/\hbar$ .

2. *Доплеровское уширение узкой спектральной линии.* В этом случае имеется ансамбль атомов, движущихся с различными скоростями, но излучающих идентично с точки зрения наблюдателя, который движется вместе с атомом. Наблюдаемое с помощью спектрометра уширение линии в действительности связано с появлением из-за относительного движения многих узких линий, сдвинутых по-разному друг к другу. Этот случай не является примером в рассматриваемом здесь смысле.

3. *Радиационное уширение.* На этом случае следует сосредоточить внимание, поскольку здесь колеблющаяся частица теряет энергию за счет излучения, но в отличие от первого случая сама сохраняется.

Начнем с классического анализа процесса, допускающего распространение на область квантовой механики. При стандартном рассмотрении диполя Герца [1] учитывают излучение в свободное пространство. Однако существуют некоторые трудности, связанные с вводом в уравнение Шредингера описания неограниченного свободного пространства. Поэтому вновь обратимся к уже обсуждавшейся системе, где диполь помещен внутри большого резонатора, размеры которого могут неограниченно увеличиваться. Можно те-

перь быть уверенным, что нет иного механизма потерь, так как затухание колебаний диполя сопровождается передачу его энергии огромному числу нормальных мод незатухающих электромагнитных колебаний резонатора. Время от времени часть этой энергии, возможно, будет возвращаться диполю. Однако в обычных условиях этот эффект будет незначительным, если только не допустить ошибки, поместив диполь в центре сферического резонатора, когда излученная волна после отражения окажется вновь сфокусированной на диполь. Но даже и это не имеет особого значения, если резонатор настолько велик, что отраженная волна попадает вновь на диполь через достаточно большое время после излучения. По этой причине нечего беспокоиться о неизбежности описанного процесса в упрощенной модели, которую мы исследуем первой. В ней осциллирующий диполь представлен резонансным контуром, а резонатор заменен одномерным аналогом — линией передачи (рис. 16.2).

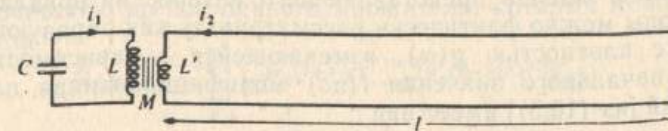


Рис. 16.2. Модель излучающего гармонического вибратора в виде LC-контура, индуктивно связанного с очень длинной линией передачи без потерь

Без связи с резонансным контуром эта линия ведет себя как линия, закороченная с обоих концов, если  $L'$  пренебрежимо мало. Ей свойственна последовательность близко расположенных друг к другу нормальных мод, в которых содержится целое число полуволн стоячей волны.  $n$ -я мода имеет частоту  $n\pi c/l$ , а частотный интервал между ними постоянен и составляет  $\pi c/l$ . Отсюда следует, что плотность состояний  $g(\omega)$ , равная числу мод в единичном интервале частот  $\omega$ , тоже постоянна и равна  $l/(\pi c)$ .

Когда контур связан с линией, нормальные моды приводят к возбуждению и линии, и контура, а связь становится особенно очевидной для тех мод, частоты которых лежат вблизи резонансной частоты  $\omega_0$  несвязанного контура. В результате частоты нормальных мод смещаются относительно своего первоначального равномерного распределения и плотность состояний изменяется. На первой стадии вычислений следует показать, что пик Лоренца с центром в точке  $\omega_0$  накладывается на первоначально плоскую кривую  $g(\omega)$ .

С другой стороны, резонансный контур обладает импедансом  $Z_r = \omega^2 M^2 / [j\omega L - j/(\omega C)] \sim \omega_0^2 M^2 / [2j(\omega - \omega_0)L]$ , когда  $\omega$  очень близко к  $\omega_0^*$ . То же самое значение  $Z_r$  получилось бы при увеличении длины линии на  $\Delta l$ , при котором  $jZ_0 \tan(\omega \Delta l/c)$

\* При анализе этого контура приняты те же обозначения, что и в гл. 3 (см. § 3.3);  $j$  можно по желанию читать как  $i$ .



было бы равно  $Z$ , (см. § 7.1). Поэтому контур меняет частоту любой данной моды на  $\Delta\omega$ , где  $\Delta\omega/\omega = -\Delta l/l$ , т. е.

$$\Delta\omega = (c/l) \operatorname{tg}^{-1}(\delta_0/\delta). \quad (16.5)$$

Здесь  $\delta = \omega - \omega_0$ , а  $\delta_0 = \omega_0^2 M^2 / (2Z_0 L)$ . Моды с частотами, намного большими и намного меньшими  $\omega_0$ , для которых  $|\delta_0/\delta| \ll 1$ , едва ли окажутся затронутыми, но это замечание не имеет прямого отношения к делу.

В то время как  $\delta$  меняется от больших положительных значений до больших отрицательных,  $\operatorname{arctg}(\delta_0/\delta)$  изменяется на  $\pi$ , так что с одной ли стороны от резонанса или с другой, но совокупность мод пробегает всю область, давая возможность появиться одной дополнительной моде — той, которую вносит резонансный контур.

Перегруппировка происходит преимущественно в интервале частот порядка  $\delta_0$ , и если линия столь длинна, что  $c/l \ll \delta_0$ , то любой сдвиг много меньше представляющего интерес интервала частот. Тогда моды можно фактически рассматривать как образующие континуум с плотностью  $g(\omega)$ , изменяющейся в зависимости от  $\delta$ . Вместо начального значения  $l(\pi c)$  модифицированная плотность состояний [из (16.5)] имеет вид

$$g(\omega) = \frac{l}{\pi c} \left( 1 - \frac{d}{d\delta} (\Delta\omega) \right) = \frac{l}{\pi c} + \frac{\delta_0}{\pi (\delta_0^2 + \delta^2)}. \quad (16.6)$$

Дополнение к плотности состояний появляется в виде второго слагаемого в правой части выражения (16.6) — это лоренцевский пик с единичной площадью и полушириной  $2\delta_0$  со значением  $Q$ , равным  $\omega_0/(2\delta_0)$ .

Ширина этого пика определяется скоростью излучения энергии из резонансного контура в линию передачи. Независимо, чему равна эта скорость, поскольку теория электрических цепей допускает замену бесконечной линии сопротивлением  $Z_0$ , равным  $\omega^2 M^2 / Z_0$ , в резонансном контуре. Теперь колебания в  $LCR$ -контуре затухают как  $e^{-\omega'' t}$  с частотой  $\omega''$ , равной  $R/(2L)$  (см. § 2.5). Отсюда  $\omega'' = \delta_0$  и  $Q$  оказывается для контура такой же, как и для лоренцевского пика при плотности состояний  $\omega_0/(2\delta_0)$ .

Однако в этих рассуждениях использовано понятие бесконечной линии, что не так удобно для перевода на квантовый язык. Поэтому выведем результат иным способом, предполагающим перенос энергии в отдельные моды конечной линии без потерь. Центральная мысль, в которой предстоит разобраться, состоит в том, что в случае, когда в контуре возбуждены колебания, а в линии — нет, моду для связанной системы нельзя считать нормальной. Конечно, описание этого случая включает все от нормальных мод и именно их бегства приводят к экспоненциальному затуханию колебаний в контуре.

Простейшим является искусственный подход к вопросу. Записываем подходящую комбинацию нормальных мод, а затем показываем, что она проявляет требуемые свойства. В нашем случае

подходящим является острый импульс, попадающий в невозбужденный резонансный контур и отражаемый из него так же, как импульс, волочащий за собой затухающую волну, которая немедленно излучается из контура сразу вслед за импульсным возбуждением. Типичная нормальная мода с амплитудой  $A_n$  и фазой  $\varphi_n$  имеет вид стоячей волны с напряженностью поля  $E$ :

$$E(x, t) = A_n e^{i(\omega_n t + \varphi_n)} \sin(\omega_n x/c - \theta_n), \quad (16.7)$$

где  $\omega_n$  должно принимать значения  $(n\pi + \theta_n)c/l$  для того, чтобы  $E$  обратилось в нуль на дальнем конце линии. На ближнем конце  $E$  обращается в нуль не при  $x=0$ , а при  $x = -\Delta l$  вследствие импеданса, обусловленного контуром. Следовательно, из (16.5) следует  $\theta_n = \delta_0/\delta_n$ .

Особый искусственный прием, необходимый в нашем случае, заключается в том, что мы полагаем  $A_n$  не зависящей от  $n$ , а  $\varphi_n = \theta_n$  с точностью до постоянного множителя, который можно опустить. Тогда

$$E(x, t) = \sum_n \{ e^{j\omega_n(t+x/c)} - e^{j\omega_n(t-x/c)+2j\theta_n} \}.$$

Поскольку моды почти равномерно распределены по частоте, суммирование можно заменить интегрированием без веса. Результирующие изменения  $E(x, t)$  можно записать в следующем виде:

$$E(x, t) = \int_0^\infty e^{j\omega(t+x/c)} - e^{j\omega(t-x/c)+2j\theta(\omega)} d\omega. \quad (16.8)$$

Первое слагаемое описывает острый импульс, локализованный в точке  $x = -ct$ , движущийся в направлении левого конца и достигающий его в момент  $t=0$ . С этого момента он находится слева и исчезает из поля зрения. Присутствие  $\theta(\omega)$  во втором слагаемом, которое описывает последующее поведение системы при положительных  $x$ , показывает, что отраженный импульс искажен.

Определим это второе слагаемое в точке  $x=0$ , записав его в виде

$$E(0, t) = e^{j\omega_0 t} \int_{-\infty}^\infty e^{j[\delta t + 2 \operatorname{tg}^{-1}(\delta_0/\delta)]} d\delta. \quad (16.9)$$

Здесь, как и раньше,  $\delta = \omega - \omega_0$ . Нижний предел интегрирования сдвинут со значения  $-\omega_0$  в  $-\infty$ . Эта замена облегчает вычисление (16.9) с помощью интегрирования по контуру, без нанесения ущерба интересной части результата, которая представляет собой послезеффект, следующий за импульсом.

Подынтегральное выражение в (16.9) имеет один простой полюс в точке  $\delta = j\delta_0$ . Когда  $t < 0$ , то  $e^{j\delta t}$  убывает с уменьшением  $\delta$ . Интегрирование по полуокружности также действительную



ось. Поскольку полюса исключены, равенство (16.9) обращается в нуль при всех отрицательных  $t$ . Однако, когда  $t$  положительно, положительный полукруг нужно использовать для замыкания контура, который теперь включает полюс. Таким образом, если не учитывать постоянный множитель в остатке, то интеграл определяется величиной  $e^{i\omega t}$  в полюсе, т. е. величиной  $e^{-\delta_0 t}$ , и  $E(0, t) \sim e^{(i\omega - \delta_0)t}$ , когда  $t > 0$ . Эта затухающая осцилляция  $E$ , разумеется, вызвана колебаниями в контуре. Анализ показывает, что она убывает как  $e^{-\delta_0 t}$  — результат, известный из теории контура.

Чтобы закончить этот параграф, стоит подчеркнуть, что лоренцевский пик шириной  $2\delta_0$  является пиком плотности очень тесно расположенных четких линий, каждая из которых есть свободная от потерь нормальная мода полной системы. Если кто-то хочет думать об этом как о дополнительном уширении линии, наложенном на непрерывный спектр мод линии передачи, характерный только для одного излучающего осциллятора с радиационным затуханием, то в этом вреда нет. Наверное, это полезное образное упрощение. Но с фундаментальной точки зрения термин «расширенный энергетический уровень» не имеет смысла в квантовой механике, и разумно держать в уме интерпретацию, связанную с уширением пика в плотности состояний.

### 16.3. ИЗЛУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В СВОБОДНОЕ ПРОСТРАНСТВО

Нетрудно распространить проведенные рассуждения на случай перекачки осциллирующим диполем энергии в моды большого резонатора\*.

Однако, уточняя связь диполя с модами резонатора, нужно быть осторожным. Следует помнить, что из большого числа мод, лежащих внутри любого узкого интервала частот, некоторые будут иметь узлы, а другие — пучности стоячей волны электрического поля  $E$  в точке расположения диполя. Первые будут несвязанными, а вторые — наиболее сильно связанными с ним. Будут иметь место и все промежуточные случаи. Более того, будут представлены все поляризации  $E$ , но связанной с диполем окажется лишь та компонента, которая ему параллельна. Эти факты следует учитывать при рассмотрении, поскольку каждой моде приписывается одно и то же среднее значение связи из-за предположения, что квадрат среднеквадратичного значения поля, ответственного за связь, равен  $1/3 \bar{E}^2$ , где  $\bar{E}^2$  — истинный квадрат напряженности поля в резонаторе.

\* Сделать это, конечно, нетрудно, но, видимо, и нецелесообразно. Здесь мы сталкиваемся с очень серьезной проблемой сходимости, которая отсутствовала в предыдущем примере. Это обстоятельство будет обсуждено в конце главы. Оно составляет основную трудность электромагнетизма, но здесь, как и во многих других случаях, им, по-видимому, можно пренебречь без нанесения ущерба теории.

Теперь в примере с линией передачи выразим  $\delta_0$  в форме, позволяющей по аналогии немедленно записать для резонатора:

энергия в колебательном контуре  $E_1 = 1/2 Li^2_1$ ;

энергия в моде линии передачи  $E_2 = 1/4 Z_0 li^2_2/c$ ;

энергия связи  $E_{12} = Mi_1 i_2$ .

Плотность мод на частоте контура  $g(\omega) = l/(\pi c)$ .  $i_1$  и  $i_2$  — амплитудные значения токов для контура и для линии. В этих переменных

$$\delta_0 = \omega_0^2 M^2 / (2Z_0 L) = \pi \omega_0^2 g(\omega) E_2^2 / (16 E_1 E_2). \quad (16.10)$$

Для диполя массой  $m$ , зарядом  $e$ , совершающего колебания с амплитудой  $a$ , соответствующие величины для данной моды равны  $E_1 = 1/2 m \omega_0^2 a^2$ ,  $E_2 = 1/2 \epsilon_0 \bar{E}^2 V = 1/2 \bar{E}^2 V / (\mu_0 c^2)$  и  $E_{12} = aeE_1$ . Здесь  $V$  — объем резонатора, а  $\bar{E}_1$  — максимальное значение электрического поля, параллельного диполю (мы еще не брали среднего значения). Далее [2],  $g(\omega_0) = \omega_0^2 V / (\pi^2 c^3)$ . Подставляя в (16.10) и записывая  $e^2 a^2 \bar{E}_1^2 = 1/3 e^2 a^2 \bar{E}^2$ , для среднего значения  $E^2_{12}$  имеем

$$\delta_0 = \mu_0 \omega_0^2 e^2 / (12 \pi m c).$$

Постоянная времени для затухания энергии  $\tau_e$  равна  $1/(2\delta_0)$ , т. е.

$$\tau_e = 6 \pi m c / (\mu_0 \omega_0^2 e^2). \quad (16.11)$$

Иначе, скорость потерь энергии диполем

$$-\dot{W} = E_1 / \tau_e = \mu_0 \omega_0^4 e^2 a^2 / (12 \pi c), \quad (16.12)$$

что в точности совпадает с выражением Герца [1] для скорости излучения диполя в открытое пространство.

Таким образом, можно быть удовлетворенным, что диссипативный излучательный процесс можно представить с помощью множества недиссипативных обменов энергией с нормальными модами резонатора, если только резонатор достаточно велик, чтобы спектр мод можно было считать непрерывным. Это тот же самый критерий, который обеспечивает отсутствие возврата отраженной волны к диполю в течение долгого времени после того, как имело место затухание. В этом случае в любой момент времени реакция резонатора на диполь такая же, как если бы резонатор был возбужден не полностью. Поскольку система линейна и скорость затухания всегда определяется только мгновенными условиями, она не может меняться иначе, чем по экспоненциальному закону. Эти рассуждения переносят нас в квантовую область. Отныне и впредь будем считать, что это утверждение обязательно выполняется. Если установим, что немедленно после возникновения связи с резонатором начальная скорость потерь энергии составляет  $\alpha E_1$ , то, как следствие, получим постоянную времени диссипации энергии  $1/\alpha$ .

Для иллюстрации сказанного вернемся к модели линии передачи (рис. 16.2) и рассмотрим, как изменяется со временем энергия  $l$ -й моды. На частоте  $\omega_l + \Delta$  линия представляет собой на входе



индуктивное сопротивление  $Z_0 \operatorname{tg}[(\omega_n + \Delta)l/c]$ , т. е.  $Z_0 \Delta l/c$  при малых  $\Delta$ . Тем же сопротивлением обладал бы  $LC$ -контур с резонансной частотой  $\omega_n$ , если бы  $L = 1/2 Z_0 l/c$ . Удобно заменить линию передачи этим эквивалентным контуром и таким образом свести задачу перекачки энергии в моду к стандартной задаче переноса энергии между связанными контурами.

Для определения начального затухания  $E_1$  предположим, что ток  $i_1$  осциллирует с постоянной амплитудой и возбуждает в связанном  $LC$ -контуре э. д. с.  $\omega_0 M i_1 \sin \omega_0 t$ . После возникновения возбуждения в момент  $t=0$  отклик принимает вид [см. (6.31) и § 13.10]

$$i_2(t) = -i_2 \sin \bar{\omega} t, \quad (16.13)$$

где  $\bar{\omega} = 1/2(\omega_0 + \omega_n)$ ,

$$i_2 = [2\omega_0 M c i_1 / (Z_0 l)] \sin(1/2 \delta_n t) / \delta_n,$$

$$\delta_n = \omega_n - \omega_0.$$

Энергия  $E_2$  моды равна  $1/4 Z_0 l i_2^2 / c$ , т. е.

$$E_2 = [\omega_0^2 M^2 c i_1^2 / (Z_0 l)] \sin^2(1/2 \delta_n t) / \delta_n^2 = [4\delta_0 E_1 / (g\pi)] \sin^2(1/2 \delta_n t) / \delta_n^2. \quad (16.14)$$

При записи результата в виде (16.14) подчеркивается независимость от деталей, свойственных той или иной модели. Результат может быть применен к другим системам. До тех пор, пока  $\delta_n t \ll 1$ ,  $E_2$  от времени растет квадратично, но рано или поздно энергия возвращается первому контуру. С этого времени она осциллирует между ними со средней скоростью роста, равной нулю. Когда все другие моды оказываются вовлеченными в этот процесс, можно заметить, что квадратичному росту подвержены лишь те моды, частоты которых лежат в интервале  $\pm \delta$ . Их количество устойчиво убывает как  $1/t$ , а произведение двух временных изменений приводит к увеличению полной энергии в модах, пропорциональному  $t$ .

Отсюда определяют начальную скорость затухания энергии  $E_1$  и, следовательно, постоянную времени экспоненциального радиационного затухания.

Для уточнения всех деталей результата достаточно проинтегрировать (16.14) по всем модам:

$$E_1(0) - E_1(t) = \int_{-\infty}^{\infty} E_2 g d\delta_n = (2\delta_0 E_1 t / \pi) \int_{-\infty}^{\infty} \sin^2 x dx / x^2 = 2\delta_0 E_1 t, \quad (16.15)$$

что эквивалентно тому, что постоянная времени  $\tau_e = 1/(2\delta_0)$ .

Эту скорость можно получить, если пренебречь всеми модами, за исключением тех, частоты которых находятся в интервале  $2\pi/t$ .

Для каждой из них предполагается идеальная настройка с  $\delta_n = 0$ . Таким образом, каждая подобная мода дает вклад в начальное убывание  $E_1$  в форме (16.14) с  $\delta_n = 0$ :

$$E_1(0) - E_1(t) = \delta_0 E_1(0) t^2 / (g\pi) = E_1(0) t^2 / (2\pi g \tau_e). \quad (16.16)$$

Эффективное число мод равно  $2\pi g/t$ , а общий вклад всех мод приводит к выражению (16.15).

#### 16.4. СПОНТАННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Теперь необходимо показать, как основные положения проведенного анализа можно перенести в область квантовой механики. Для этого вернемся к базовой модели осциллирующего диполя, который взаимодействует с одной-единственной модой резонатора, — к модели, которая была представлена двумя связанными вибраторами без потерь. Как уже отмечалось (см. § 16.1), в то время как  $\Psi$  эволюционирует в плоскости (см. рис. 16.1), центр  $\langle r \rangle$  (где  $r$  имеет координаты  $(\xi_1, \xi_2)$ ) описывает классическую фигуру Лиссажу. Из этого, однако, нельзя заключить, что обмен энергией между вибраторами тоже осуществляется в соответствии с классическим механизмом. Отклик  $\langle r^2 \rangle$  на приложенную силу может быть найден классическими приемами, но адекватное обсуждение переноса энергии между квантовыми системами требует, чтобы вся система в целом рассматривалась как единое квантовое образование.

Чтобы установить правила, управляющие обменом энергией, прежде всего отметим несколько общих положений. Если в любой момент времени волновая функция для двух связанных вибраторов, записанная в координатах нормальной моды, составляет  $\Psi(X_1, X_2, t)$ , то ее можно разложить в ряд Фурье по собственным функциям, которые сами являются произведениями функций нормальных мод осцилляторов:

$$\Psi(X_1, X_2, t) = \sum_n \sum_m a_{n,m} \psi_n(X_1) \psi_m(X_2) e^{-i[(n+1/2)\Omega_1 + (m+1/2)\Omega_2]t}. \quad (16.17)$$

Здесь  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$  — частоты нормальных мод, причем предполагается, что они очень близки друг к другу.

Хотя в выражении (16.17) присутствует много членов и за сложность поведения функции  $\Psi$  несут ответственность члены с различными частотами, в силу чего амплитуда функции  $\Psi$  меняется достаточно сложно, сама функция на частоте биений  $\chi = |\Omega_1 - \Omega_2|$  должна быть строго периодической. Для разных физических величин, влияющих на эволюцию функции, получаются в зависимости от возникающих гармоник на частоте биений различные периодические картины ее поведения. Однако энергия каждого из составляющих вибраторов ведет себя самым простым (из возможных) образом, выполняя только свою основную роль.

Так, например, чтобы оценить  $E_1$ , необходимо знать  $\langle \xi_1 \rangle$  и  $\langle \xi_1^2 \rangle$ . Это положение в достаточной мере иллюстрируется поведением



$\langle \xi_1^2 \rangle$ . В координатах нормальных мод  $\langle \xi_1^2 \rangle$  записывается как  $\langle X_1^2 \cos^2 \theta - 2 X_1 X_2 \cos \theta \sin \theta + X_2^2 \sin^2 \theta \rangle$ .

Оценка с использованием выражения (16.17) показывает, что только перекрестный член вносит вклад в энергию системы на частоте биений  $\chi$  или частотах их гармоник:

$$\begin{aligned} \langle X_1 X_2 \rangle &= \\ &= \sum_n \sum_m \sum_{n'} \sum_{m'} \iint a_{nm} a_{n'm'}^* \psi_n(X_1) \psi_m(X_2) X_1 X_2 \psi_{n'}^*(X_1) \psi_{m'}^*(X_2) \times \\ &\quad \times e^{i[(n-n')\Omega_1 + (m-m')\Omega_2]t} dX_1 dX_2, \end{aligned} \quad (16.18)$$

$\int \psi_n X_1 \psi_{n'} dX_1$  обращается в нуль для всех значений  $n$ , кроме  $n = n' = \pm 1$ . То же получаем и для  $X_2$ . Таким образом, единственными частотами, выявляющимися из (16.18), являются частоты  $\pm \Omega' \pm \Omega_2$ , а единственная низкая частота —  $\chi$ . Поэтому энергетический обмен между двумя вибраторами происходит чисто синусоидально.

Вообще, если два вибратора возбуждены в произвольных нестационарных состояниях, а затем подвержены связыванию, то синусоидальный обмен энергией между вибраторами первоначально в экстремальной точке не возникает, т. е.  $E_1 = -E_2 \neq 0$ . Однако существуют некоторые состояния, в которых первоначально  $E_1 = 0$ , как, например, в случае, когда до возникновения связи оба вибратора находились в стационарных состояниях. Для нас более значимым является случай, когда мода резонатора находится в своем основном состоянии, а диполь возбужден произвольно. Если после возникновения связи  $E_2$  осциллирует на частоте биений, то процесс должен начинаться в минимуме цикла. В противном случае невозможно в любые последующие моменты времени получить энергию меньшую, чем в точке минимума. Чтобы определить диапазон колебаний  $E_1$  и  $E_2$ , необходимый нам для последующего изложения, приведем рассуждения в более общей форме, чем это непосредственно требуется.

Пусть в момент возникновения связи вибраторы обладают энергией  $E_{10}$  и  $E_{20}$ :

$$E_{10} = \langle \xi_1^2 + \dot{\xi}_1^2 \rangle_0, \quad E_{20} = \langle \xi_2^2 + \dot{\xi}_2^2 \rangle_0, \quad (16.19)$$

что следует из (13.11), если за единицу энергии принять  $1/2 \hbar \omega_0$ , а все частоты считать настолько близкими друг к другу, что различиями между ними можно пренебречь, за исключением случая, когда рассматривается эффект биений. Тогда значения энергии в координатах нормальных мод получают поворотом координатных осей (см. рис. 16.1):

$$\begin{cases} E_{n1} = \langle X_1^2 + \dot{X}_1^2 \rangle = E_{10} \cos^2 \theta + E_{20} \sin^2 \theta + \\ \quad + \langle \xi_{10} \xi_{20} + \dot{\xi}_{10} \dot{\xi}_{20} \rangle \sin 2\theta; \\ E_{n2} = \langle X_2^2 + \dot{X}_2^2 \rangle = E_{10} \sin^2 \theta + E_{20} \cos^2 \theta - \\ \quad - \langle \xi_{10} \xi_{20} + \dot{\xi}_{10} \dot{\xi}_{20} \rangle \sin 2\theta. \end{cases} \quad (16.20)$$

Пусть мода резонатора первоначально находится в своем основном состоянии, тогда  $E_{10}$  и  $E_{20}$  являются экстремумами  $E_1$  и  $E_2$ . Тогда и  $\langle \xi_{20} \rangle$ , и  $\langle \dot{\xi}_{20} \rangle$  обращаются в нуль и третье слагаемое в (16.20) отсутствует. После возникновения связи  $E_{n1}$  и  $E_{n2}$  остаются постоянными, но обе нормальные моды имеют различные частоты. Следовательно,  $E_1$  и  $E_2$  осциллируют возле среднего значения, которое легко определить.

Далее, применяя обратное преобразование, получим

$$\begin{cases} E_1 = E_{n1} \cos^2 \theta + E_{n2} \sin^2 \theta - \langle X_1 X_2 + \dot{X}_1 \dot{X}_2 \rangle \sin 2\theta, \\ E_2 = E_{n1} \sin^2 \theta + E_{n2} \cos^2 \theta + \langle X_1 X_2 + \dot{X}_1 \dot{X}_2 \rangle \sin 2\theta. \end{cases} \quad (16.21)$$

Третьи слагаемые в этих выражениях осциллируют на частоте биений возле среднего значения, равного нулю. Следовательно,  $E_1$  осциллирует возле среднего значения:

$$(E_1)_{Av} = E_{n1} \cos^2 \theta + E_{n2} \sin^2 \theta = E_{10} + 1/2 (E_{20} - E_{10}) \sin^2 2\theta \quad (16.22)$$

что вытекает из (16.20).

Аналогично,

$$(E_2)_{Av} = E_{n1} \sin^2 \theta + E_{n2} \cos^2 \theta = E_{20} + 1/2 (E_{10} - E_{20}) \sin^2 2\theta. \quad (16.23)$$

Так как  $E_{10}$  и  $E_{20}$  являются экстремальными значениями для колебаний  $E_1$  и  $E_2$ , то  $E_1$  осциллирует между значениями  $E_{10}$  и  $E_{10} \cos^2 2\theta + E_{20} \sin^2 2\theta$ , а  $E_2$  — между  $E_{20}$  и  $E_{20} \cos^2 2\theta + E_{10} \sin^2 2\theta$ .

Этот результат можно сравнивать с биениями двух классических вибраторов. Если в момент возникновения связи один находится в состоянии покоя с  $E_{20} = 0$ , то движение (как показано на рис. 16.1) первоначально представляет собой колебания между точками  $A$  и  $A'$ . Через полпериода биений колебания происходят вдоль линии  $BB'$ ,  $E_2$  достигает своего максимального значения  $E_{10} \sin^2 2\theta$ , а  $E_1$  — своего минимального  $E_{10} \cos^2 2\theta$ . Квантовое поведение оканчивается почти таким же, за исключением состояния с нулевой энергией  $E_{20}$ . Фактически осцилляции энергии в точности такие же, как если бы обе исходные величины  $E_{10}$  и  $E_{20}$  были вовлечены в независимые классические биения так, что, когда от первого вибратора ко второму передается энергия  $E_{10} \sin^2 2\theta$ , одновременно энергия  $E_{20} \sin^2 2\theta$  передается в обратном направлении. Можно представить себе и то, что энергия возбуждения  $E_{10} - E_{20}$  вовлечена в какой-то другой классический процесс.



Очевидным шагом после этого будет применение целиком всего классического описания к затуханию дипольного осциллятора в пустом резонаторе. Экспоненциальное затухание с постоянной времени  $1/(2\delta_0)$  обеспечивается не полной энергией излучения, а только энергией возбуждения  $E - \frac{1}{2}\hbar\omega_0$ . При этом постоянная времени та же самая, что и в теории излучения Герца.

#### 16.5. ЗАКОН ИЗЛУЧЕНИЯ ПЛАНКА. КОЭФФИЦИЕНТЫ ЭЙНШТЕЙНА

Идею независимого энергетического обмена между двумя вибраторами можно рассматривать как наиболее примитивную форму теории обменов Прево, являющуюся, в свою очередь, фундаментальной в теории радиационного переноса теплоты. Отсутствие связи между противоположными путями следования этого классического процесса легко оправдывается предположением об отсутствии фазовой корреляции между вибраторами. Таким образом, когда колеблющийся диполь помещают в уже возбужденный резонатор, начальный перенос энергии возникает в результате взаимодействия осциллирующего тока диполя с осциллирующим электрическим полем мод вибратора, среднее значение которого равно нулю, если усреднение охватывает все возможные фазовые соотношения. Через некоторое время, когда диполь и резонатор успеют повлиять на колебания друг друга и внести корреляцию в соотношение фаз, среднее значение переноса энергии становится не равным нулю и фактически принимает то же самое значение, как если бы каждый из них (и диполь, и резонатор) был связан с невозбужденным вибратором. Доказательство этих утверждений предоставим читателю как простое упражнение.

Сказанное выше верно и в том случае, когда оба квантованных вибратора связаны и усреднение проводится по всем возможным значениям разностей фаз. Возможно, это и слишком отдаленное представление об ансамбле диполей в возбужденном резонаторе, но на самом деле нет необходимости столь широко раскрывать фазовые соотношения, чтобы достичь эффекта хаотизации. Если диполь и мода резонатора оказываются в некоторых, не обязательно стационарных возбужденных состояниях, а затем возникает связь между ними, то в общем случае происходит немедленный перенос энергии, причем, как уже отмечалось,  $E_1 = -E_2 \neq 0$ .

Многokrатно повторим этот эксперимент, оставляя начальные условия в точности одинаковыми, но меняя промежутки времени до возникновения связи, т. е. предполагая различными относительные фазы обоих вибраторов в начальный момент. Тогда процессы переноса энергии в обоих направлениях в среднем окажутся независимыми.

Доказательство этого следует незамедлительно. В каждом эксперименте  $E_1$  стартует с одного и того же значения  $E_{10}$ , но колебания отличаются по амплитуде, несмотря на то что они всегда синусоидальны и имеют одну и ту же частоту  $\chi$ . Следовательно, сред-

нее значение также будет меняться синусоидально с частотой  $\chi$ . Более того, хотя  $E_1$  в большей части экспериментов первоначально не равно нулю, среднее значение  $E_{10} = 0$ , поскольку положительные и отрицательные  $E_{10}$  равновероятны. Отсюда следует, что осцилляции энергии  $E_1$  начинаются с экстремума, а ее среднее значение приблизительно равно  $(E)_{Av}$ , причем усреднение  $(E_1)_{Av}$  производят по всем экспериментам. Через некоторое время, когда вибраторы окажутся связанными, но предпочтительной фазовой корреляции между нормальными модами еще не будет, то  $\langle X_1 X_2 \rangle$  и  $\langle \dot{X}_1 \dot{X}_2 \rangle$  равны нулю. Таким образом,  $(E_1)_{Av}$  получают, отбросив в (16.21) последнее слагаемое.

Дальнейшие рассуждения будут точно такими же, как в случае, когда мода резонатора изначально была в стационарном состоянии с энергией  $E_1$ , осциллирующей между значениями  $E_{10}$  и  $E_{10} \cos^2 \theta + E_{20} \sin^2 \theta$ . А это, как было уже показано ранее, тот же случай, как если бы возбужденный диполь и невозбужденная мода резонатора обменивались энергией. Действительно, при помещении возбужденного диполя в возбужденный резонатор найдется достаточное число мод с близкими частотами и беспорядочными фазами для того, чтобы обеспечить направленный усредненный перенос энергии вдоль линии, описываемой (16.16), при условии, что все моды резонатора находились бы в своих основных состояниях. Аналогично, усредненный перенос энергии из мод резонатора в диполь начинается так, как если бы диполь находился в своем основном состоянии.

Из всего сказанного ясно, что если энергия возбуждения диполя определяет среднюю энергию мод резонатора той же частоты, то выраженного переноса энергии не будет. Поэтому тепловое равновесие между материальными осцилляторами и модами резонатора достигается, когда и те и другие имеют одинаковую зависимость средней энергии от частоты. Это, разумеется, и было выводом Планка, основанным на очень тщательном и, очевидно, очень громоздком анализе процессов взаимодействия. Оно привело к закону излучения абсолютно черного тела.

Средняя энергия возбуждения квантованного гармонического осциллятора и, следовательно, моды резонатора составляет  $\hbar\omega/(e^{\hbar\omega/(k_B T)} - 1)$ . Поскольку плотность состояний на единицу объема резонатора равна  $\omega^2/(\pi^2 c^3)$ , плотность энергии (за исключением нулевой) на единицу частоты  $\omega$  принимает теперь знакомый вид

$$u(\omega) = [\hbar\omega^3/(\pi^2 c^3)] / (e^{\hbar\omega/(k_B T)} - 1). \quad (16.24)$$

Через восемьдесят лет после открытия полученному результату можно вполне доверять, поэтому нет крайней необходимости проводить тщательный анализ Планка. Мы уже видели, что выбор координат, связанных с энергией, для описания связанных осцилляторов устраняет из рассуждений все параметры, определяя их зна-



чение или состав. В этих терминах материальный осциллятор и мода резонатора на одной и той же частоте становятся в точности эквивалентными. Условие статистического равновесия не может быть иным, чем то, что их координаты (а следовательно, и энергетические величины) должны быть одинаковыми. Однако ожидать, что Планк увидел это, означает игнорирование трудностей первооткрывателя. Это значит, пользуясь комфортом лимузина, не думать о тех, кто ехал по дороге через джунгли на лошадях.

В 1916 г. Эйнштейн опубликовал свой знаменитый анализ [3] проблемы излучения абсолютно черного тела, введя в рассмотрение спонтанные и стимулированные процессы. Может показаться, что было привлечено два довольно разных механизма: с одной стороны, стимулированное излучение и поглощение, которым соответствует взаимодействие мод резонатора с материальным осциллятором, и с другой — спонтанное излучение, которое при поверхностном рассмотрении вовсе не предполагает, что моды резонатора играют какую-либо роль.

Однако из нашего обсуждения ясно, что это точно то же самое связывание между диполем и модами резонатора, которое управляет обоими процессами, и что (по крайней мере, если диполем является гармонический осциллятор) возможно совершенно симметричное описание через спонтанное излучение как со стороны диполя, так и со стороны резонатора. К сожалению, во многих работах вокруг спонтанного излучения создается атмосфера таинственности и утверждается, что оно находится вне пределов волновой механики Шредингера. Иногда даже указывается, что нулевые колебания (см. § 20.6) резонатора нужны, чтобы возбудить спонтанное излучение, как это было, когда утверждалось, что изолированный диполь должен иметь под рукой подходящий потребитель энергии.

Однако мы уже видели, что эти трудности исчезают, если только признать, что свободные колебания диполя в невозбужденном резонаторе не составляют нормальной моды.

Обнаруженное обстоятельство говорит о том, что нулевая энергия не имеет отношения к данному обсуждению и поэтому здесь ею лучше пренебречь — в описание переноса входят только энергии возбуждения состояний выше основного\*.

Тем не менее установление соответствия между точкой зрения Эйнштейна и тем, что излагалось здесь, еще предстоит. Для этого применим его рассуждения к ансамблю одинаковых диполей (гармонических осцилляторов), связанных с излучением абсолютно черного тела в резонаторе. В соответствии с положениями квантовой теории Бора естественно предположить, что каждый осциллятор в любой момент времени занимает строго определенный энер-

\* Однако не следует понимать, что сказанное означает принципиальную недоступность наблюдения нулевых эффектов. Они проявляются в отклонении рентгеновского излучения, в изменении интенсивности дифракции нейтронов, с помощью их объясняют текучесть гелия вблизи 0 К.

гетический уровень. Из  $n_l$  осцилляторов, занимающих уровень  $l$ , некоторые совершают спонтанные переходы на уровень  $l-1$ , а другие в результате действия излучения стимулируются к переходам вверх или вниз. Скорости —  $\dot{n}_l$  для всех трех процессов по Эйнштейну должны быть записаны как  $A_l n_l$ ,  $B_{l+1} n_l u(\omega_0)$  и  $B_l n_l u(\omega_0)$ . Здесь представлены только соседние уровни, а  $A_l$  и  $B_l$  являются коэффициентами для спонтанных и стимулированных процессов между уровнями  $l$  и  $l-1$ , в то время как  $B_{l+1}$  — коэффициент для стимулированных процессов между уровнями  $l$  и  $l+1$ . Тогда средняя скорость поступления энергии для каждого осциллятора, который оказался возбужденным на уровне  $l$ , может быть записана так:

$$\dot{W}_l = (-A_l - B_l u + B_{l+1} u) \hbar \omega_0. \quad (16.25)$$

Мы уже видели, что интенсивность осциллятора пропорциональна (см. § 13.7) квантовому числу верхнего из двух вовлеченных уровней. Положим  $B_l = \beta l$ , считая, что  $\beta$  имеет одинаковое значение для всех уровней. Тогда

$$\dot{W}_l = (-A_l + \beta u) \hbar \omega_0. \quad (16.26)$$

Это равенство имеет в точности ту же форму, которая нужна для согласования различных точек зрения. Каждый осциллятор на уровне  $l$  излучает энергию со скоростью  $A_l \hbar \omega_0$ , которая не зависит от  $u$ . Остается только показать, что вычисленные выражения для  $A_l$  и  $\beta$  имеют смысл. Вернемся к выражению (16.12), приняв  $a$  за амплитуду классического вибратора с энергией  $l \hbar \omega_0$ , так что

$$A_l = \mu_0 \omega_0^2 e^2 l / (6 \pi m c). \quad (16.27)$$

Отметим, что  $\beta \hbar \omega_0$  есть скорость поглощения осциллятором энергии из радиационного поля, когда он находится в основном состоянии  $l=0$ , для которого  $\beta_{l+1} = \beta$ . Это совпадает со скоростью для эквивалентного классического осциллятора, начинающего движение за состояния покоя. Хаотичность фазы приводит к возрастанию энергии, вызванному тем, что каждая мода аддитивна. Здесь применимы те же самые рассуждения, которые привели к выражению (16.16). Они состояли в том, что через время  $t$  суммарный эффект таков, как если бы вклад вносился только модами в интервале  $2\pi/t$  возле частоты  $\omega_0$ . Плотность энергии в этих модах составляет  $2\pi u/t$ , так что средний квадрат той компоненты электрического поля, которую можно считать действующей на диполь, будет равен  $4/3 \pi u / (\epsilon_0 t)$ . Так как поле  $E$ , осциллирующее в резонансе, поставляет за время  $t$  энергию  $1/8 e^2 E^2 t^2 / m$ , то диполь приобретает энергию со скоростью  $1/6 \pi e^2 u / (\epsilon_0 m)$  или  $1/6 \pi \mu_0 e^2 c^2 u / m$ .

Отсюда

$$\beta = 1/6 \pi \mu_0 e^2 c^2 / (\hbar m \omega_0) \quad (16.28)$$

и

$$A_l / B_l = \hbar \omega_0^3 / (\pi^2 c^3) = \hbar \omega_0 g / V. \quad (16.29)$$



Как хорошо известно из обычных исследований проблемы излучения, соотношение (16.29) представляет собой то отношение коэффициентов спонтанного и стимулированного процессов, которое нужно, чтобы закон Планка вытекал из теории Эйнштейна.

Уравнение, определяющее суммарный обмен энергией между излучением резонатора и ансамблем осцилляторов, вытекает из (16.26), которое с учетом (16.29) можно записать в форме

$$\dot{W}_I = \beta \hbar \omega_0 (u - I \hbar \omega_0 g / V). \quad (16.30)$$

Суммируя по всем осцилляторам, находим, что их полная энергия возбуждения  $E$  подчиняется уравнению

$$\dot{E} = \sum_i n_i \dot{W}_I = \beta \hbar \omega_0 (Nu - gE/V), \quad (16.31)$$

так как  $N = \sum n_i$ , общее число осцилляторов  $E = \sum n_i \hbar \omega_0$ . Отсюда следует, что средняя энергия осциллятора  $\bar{E} = E/N$  релаксирует к своему равновесному значению  $uV/g$  в соответствии с уравнением

$$\dot{\bar{E}} = (\beta \hbar \omega_0 g / V) (uV/g - \bar{E}). \quad (16.32)$$

Постоянная времени  $\tau_e$  равна  $V/(\beta \hbar \omega_0 g)$  и не зависит от  $u$ . Это именно тот результат, который и ожидался из квазиклассического представления об обмене энергией между модами резонатора и осцилляторами, согласно которому каждый из них ведет себя так, как если бы он один был возбужден. Разумеется, значение совпадает с классическим (со значением Герца), определенным (16.11).

В столь сильном подчеркивании строгой взаимности обменов между материальным осциллятором и модой резонатора таится некоторая опасность сокрытия важного различия между спонтанными и стимулированными процессами. Рассмотрим, например, излучение, попадающее на поверхность, частично отражаемое, а частично поглощаемое ею. Если материал поверхности холодный, то его отклик на излучение полностью приписывается стимулированным процессам и коэффициенты отражения и поглощения определяются амплитудой и фазой колебаний диполя, возбужденных падающим полем. Если материал горячий, то его собственные колебания возбуждены совершенно независимо от падающего поля и не имеют определенной фазовой связи с этим полем. В классической физике эти процессы, когда они происходят с гармоническими вибраторами, являются несвязанными. Поэтому можно наблюдать спонтанное излучение накаливаемого докрасна металлического листа, не смешивая это излучение с отражением яркого света, которым металл облучается. Дополнительные колебания диполей, вызванные последним, когерентны по фазе с колебаниями источника. Не так-то легко оценить это положение, если считать, что материальные вибраторы, не имея дипольного момента, существуют только в чисто квантовых состояниях.

Однако если представить себе падающее излучение хорошо сфазированным, то, как известно из гл. 13 (см. § 13.9), возбужденное в вибраторах дополнительное движение в основном будет таким же, как если бы вибраторы были классическими и первоначально находились в состоянии покоя. Таким образом, перенос энергии из поля к вибраторам сопровождается когерентным возбуждением. При обратном процессе передача энергии от вибраторов радиационному полю также происходит когерентным образом. Это и есть процессы стимулированного поглощения и излучения. Спонтанный процесс излучения в основном не отличается от стимулированного, за исключением того, что излучающая система не имеет фазовой связи с падающим полем.

Итак, мы значительно продвинулись вперед, не привлекая квантово-механических уравнений движения. Однако далее потребуются более детальный анализ. Поэтому дальнейшее обсуждение радиационных процессов мы отложим и подведем некоторые итоги в гл. 18 и 20 (см. § 18.4 и 20.6).

#### 16.6. РАСХОДИМОСТЬ В ТЕОРИИ ИЗЛУЧЕНИЯ ДИПОЛЯ. УВЕЛИЧЕНИЕ МАССЫ

Обсуждение расширения уровней, происходящего вследствие спонтанного излучения, проведено в терминах взаимодействия материального осциллятора с модами резонатора, имеющими очень близкие частоты. Мы не задавались вопросом о влиянии высокочастотных мод, которые, к сожалению, приводят к расходящемуся интегралу. Здесь будет уместно сформулировать задачу заново через характеристики ансамбля не связанных между собой вибраторов, каждый из которых представляет собой моду резонатора, связанную с материальным осциллятором. Нормальные моды такой системы можно соотнести с решениями сравнительно простого уравнения.

Для простоты пренебрежем изменениями поляризации и местонахождения максимума поля от одной моды к другой, считая все моды связанными с осциллятором при среднем значении постоянной связи. Когда энергия  $i$ -й моды будет полностью обусловлена электрическим полем  $\frac{1}{2} \epsilon_0 E^2 V$ , приравняем ее к энергии эквивалентного материального вибратора  $\frac{1}{2} \mu_i \dot{x}_i^2$ , а поле, действующее на заряд осциллятора, примем равным  $(\frac{1}{3} E^2)^{1/2}$ . Таким образом, поле будет иметь напряженность  $[\mu_i / (3 \epsilon_0 V)]^{1/2} x_i$  и действовать на осциллирующий заряд с силой  $c_i x_i$ , где  $c_i = e[\mu_i / (3 \epsilon_0 V)]^{1/2}$ . При учете всех мод уравнение движения материального осциллятора примет вид

$$m_0 \ddot{x}_0 + \nu_0 x_0 - \sum_i c_i x_i = 0. \quad (16.33)$$

Соответственно дипольный момент осциллятора видоизменяет соответствующим образом уравнение движения каждой моды (это можно легко доказать):



$$m_i \ddot{x}_i + \mu_i x_i - c_i x_0 = 0. \quad (16.34)$$

Пусть для нормальной моды решения системы уравнений (16.33) и  $N$  уравнений, аналогичных (16.34), имеют частоту  $\Omega$ . При подстановке подобранного решения условие совместности  $(N+1)$ -го

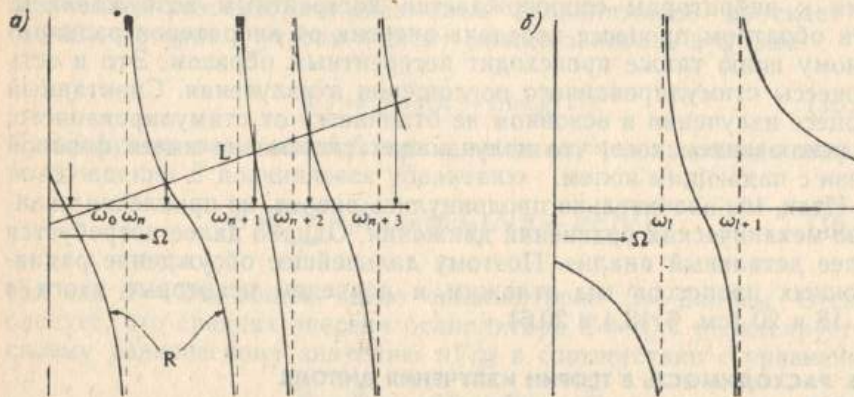


Рис. 16.3. Схематическое изображение левых ( $L$ ) и правых ( $R$ ) частей соотношения (16.37) как функций  $\Omega(q)$ ; нормальные моды соответствуют пересечениям, отмеченным стрелками; именно наклон  $L$  приводит к пропорциональному смещению соответствующих мод и ведет к их небольшому сгущению. Вклад  $R$  в две последовательные моды ( $b$ )

уравнения будет состоять в том, чтобы определитель из коэффициентов обращался в нуль:

$$\begin{vmatrix} \mu_0 - m_0 \Omega^2 & -c_1 & -c_2 \\ -c_1 & \mu_1 - m_1 \Omega^2 & 0 \\ -c_2 & 0 & \mu_2 - m_2 \Omega^2 \dots \\ \vdots & \vdots & \end{vmatrix} = 0. \quad (16.35)$$

После выполнения умножения и деления на  $(\mu_1 - m_1 \Omega^2)(\mu_2 - m_2 \Omega^2) \dots (\mu_N - m_N \Omega^2)$  уравнение для  $\Omega$  принимает вид

$$\mu_0 - m_0 \Omega^2 = \sum_i c_i^2 / (\mu_i - m_i \Omega^2), \quad (16.36)$$

т. е.

$$\omega_0^2 - \Omega^2 = [e^2 / (3m_0 \varepsilon_0 V)] \sum_i \omega_i^2 / (\omega_i^2 - \Omega^2). \quad (16.37)$$

Правая часть соотношения (16.37) очень быстро осциллирует, достигая  $\pm\infty$  при каждом значении  $\Omega$ , которое совпадает с частотой моды резонатора. Как показано на рис. 16.3,  $a$ , наименьший наклон график функции имеет в точках, лежащих приблизительно на половине расстояния между последовательными модами. Ясно, что решения наиболее сильно сгруппированы там, где пересечения

линий, представляющих левую и правую части соотношений (16.37), лежат возле точек минимального наклона. Их мы примем за центр уширенной линии. Чтобы определить его положение, предположим, что он находится между точками  $\omega_l$  и  $\omega_{l+1}$ , вклад которых в правую часть соотношения (16.37) показан на рис. 16.3,  $b$ . Если справедливо наше предположение, минимальный наклон происходил бы на оси и линия имела бы центр в точке  $\omega_0^2 - \Omega^2 = 0$ . Однако можно ожидать, что вклад других мод в правую часть выражения (16.37) дает относительно малый наклон кривой, но не обязательно малую величину. Центр линии окажется там, где  $\omega_0^2 - \Omega^2$  равна этому вкладу. Поэтому вычислим (16.37), исключив из суммы точки в непосредственной близости от  $\Omega$ . При больших  $V$  и соответственно плотном распределении мод сумму можно заменить главным значением интеграла, т. е.

$$m_0 (\omega_0^2 - \Omega^2) = \frac{e^2}{3\varepsilon_0} \oint \frac{\omega^2 g(\omega)}{\omega^2 - \Omega^2} d\omega, \quad (16.38)$$

в котором  $g(\omega)$  — плотность состояний на единицу объема резонатора, т. е.  $\omega^2 / (\pi^2 c^3)$ . Тогда

$$m_0 (\omega_0^2 - \Omega^2) = \frac{e^2}{3\pi^2 \varepsilon_0 c^3} \oint \frac{\omega^4}{\omega^2 - \Omega^2} d\omega. \quad (16.39)$$

Оснований обрывать спектр мод резонатора на какой-либо конечной частоте нет, и выдвинутая при анализе проблема немедленно становится очевидной, поскольку интеграл в соотношении (16.39) на больших частотах расходится как  $\omega^3$ . В модели, изображенной на рис. 16.2, таких трудностей не возникает. Анализ индуктивно связанных контуров показывает, что уравнение, соответствующее выражению (16.38), в числителе интеграла не содержит  $\omega^2$ . Поскольку для линии передач  $g(\omega) = \text{const}$ , интеграл, подлежащий вычислению, имеет вид  $\oint_0^{\infty} d\omega / (\omega^2 - \Omega^2)$ , а он равен нулю.

Таким образом, ранее полученный результат подтвержден.

Чтобы вернуться к осциллирующему диполю, интеграл в соотношении (16.39) можно удобно перегруппировать:

$$\oint \frac{\omega^4}{\omega^2 - \Omega^2} d\omega = \int (\omega^2 + \Omega^2) d\omega + \Omega^4 \oint \frac{d\omega}{\omega^2 - \Omega^2}. \quad (16.40)$$

Если произвольно зафиксировать верхний предел интегрирования  $\omega_m \gg \Omega$ , то второй интеграл, исчезающий при  $\omega_m \rightarrow \infty$ , окажется очень малым по сравнению с первым и им можно пренебречь.

В этом случае  $m_0 (\omega_0^2 - \Omega^2) = [e^2 / (3\pi^2 \varepsilon_0 c^3)] (1/3 \omega_m^3 + \Omega^3 \omega_m)$ ,

$$\text{или} \quad [m_0 + e^2 \omega_m / (3\pi^2 \varepsilon_0 c^3)] \Omega^2 = \mu_0 - e^2 \omega_m^3 / (9\pi^2 \varepsilon_0 c^3). \quad (16.41)$$

Поэтому можно считать, что взаимодействие между зарядом и его полем приводит к увеличению массы осциллирующего заряда



и уменьшению возвращающей силы. Последний эффект, пропорциональный  $\omega_m^3$ , представляет собой собственную нестабильность заряженной частицы в классической электромагнитной теории. Это неприятное явление уже отмечалось в гл. 7 (см. § 7.7), и сейчас добавить нечего, за исключением того, что от него не просто избавиться как при проведении классических, так и квантовых исследований. Достижения квантовой электродинамики показали, что можно жить в тени подобных бесконечностей и выдумывать методические приемы для получения правильных ответов на множество проблем, делая вид, что самих проблем нет [4].

Более слабую расходимость в левой части (16.41) (в отличие от более сильной в правой части) можно контролировать. Для этого нужно приписать осциллирующему заряду радиус, не равный нулю. Предположим, например, что заряд равномерно распределен по поверхности сферы радиуса  $a$ . Тогда нетрудно показать, что поле, изменяющееся как  $E_0 e^{ikx}$ , воздействует на заряд с силой, которая равна не  $eE_0$ , а  $eE_0 \sin(ka)/(ka)$ . В свете этого можно заменить соответствующую часть в (16.40), которая равна  $\int \Omega^2 d\omega$ ,

на  $c \int_0^\infty \Omega^2 \sin kadk/a$ , потому что  $\omega = ck$ . В (16.41) дополнительная масса учтена благодаря замене  $\omega_m$  на  $\pi c/(2a)$ . Таким образом, эффективная масса будет составлять  $m_0 + e^2/(6\pi\epsilon_0 c^2 a)$ .

Теперь энергия электростатического поля снаружи заряженной сферы составляет  $e^2/(8\pi\epsilon_0 a)$ , и если применить соотношение Эйнштейна между массой и энергией, то можно ожидать, что эта энергия эквивалентна массе  $e^2/(8\pi\epsilon_0 c^2 a)$ , что составляет  $3/4$  от той величины, которая только что была получена.

История электродинамики начиная примерно с 1880 г. до работы Эйнштейна (1905) полна попыток найти точное соотношение между электростатической энергией и массой, но эти попытки приводили к числовым коэффициентам порядка единицы. Поскольку мы решили проигнорировать большую расходимость в правой части (16.41), было бы удивительно, если бы последующий анализ дал правильный ответ. Тем не менее вид поправки к массе оправдывает то, что ее относят к энергии поля, даже если и признать, что это скорее полумера, чем выход из положения. Признание того, что электрон с точечными размерами обладает конечной массой, составляет основополагающее положение теории частиц. Именно здесь теория перенормировки успешно позволяет обойти это противоречие.

Проблема расходимости не возникает в тех случаях, когда осциллятор, помещенный в твердое тело, легче взаимодействует с колебаниями решетки (фононами), чем с электромагнитными колебаниями резонатора (фотонами), поскольку атомное строение твердого тела предписывает существование естественного порога в верхней части спектра колебаний.

Для заданной энергии колебательной моды электрическое поле, связанное с колебаниями решетки, обычно гораздо слабее, чем электрическое поле, связанное (до известной степени более слабо) с той же модой резонатора, имеющего размеры и форму твердого тела. Однако плотность состояний теперь ближе не к  $\omega^2/(\pi^2 c^3)$ , а к  $\omega^2/(\pi^2 v_s^3)$ , где  $v_s$  — скорость звука, которая, возможно, в  $10^4$  —  $10^5$  раз меньше  $c$ . Эта гораздо большая плотность состояний попросту заставляет фононы доминировать над фотонами в механизме энергетического обмена. В подтверждение тому увеличение массы вследствие поляризации решетки может быть весьма существенным [5]. В этом случае нет необходимости прибегать к соотношениям Эйнштейна: заряженная частица упруго деформирует решетку вокруг себя и увеличивает локальную плотность. Если частица движется, то избыточная масса должна также двигаться вместе с ней. Во всяком случае, это верно для медленных колебаний частицы или для медленного движения заряженной частицы в твердом теле; такое движение можно описать выражением, аналогичным соотношению (16.41). Однако если колебания частицы происходят на частоте, много большей  $\omega_m$ , то последнее слагаемое, которым мы пренебрегли в (16.40), становится существенным. В самом деле, при  $\Omega \gg \omega_m$  оно гасит увеличение массы. Если увеличить частоту колебаний частицы так, чтобы она была больше любой возможной частоты решетки, то решетка не будет реагировать на это движение и с ее стороны вклада в массу частицы не произойдет. Альтернативный способ визуализировать процесс — через параметры отклика частицы на импульс силы. В момент приложения импульса  $P$  частица начинает движение вперед со скоростью  $P/m_0$ , откликаясь так, как если бы она была свободной, что уже отмечалось в гл. 13. Она мгновенно оставляет позади себя оболочку из виртуальных фононов (т. е. локальную деформацию решетки); однако через промежуток времени порядка  $1/\omega_m$  фононы тоже начинают воздействовать на частицу. Реагируя таким образом, решетка затаскивает частицу назад, так что в конечном счете и частица, и деформация решетки взаимодействуют на более низкой скорости  $P/(m_0 + m_{ph})$ , где  $m_{ph}$  есть увеличение массы фонона.

Это обсуждение, возможно, отвлекло наше внимание от главного вопроса, который состоит в описании процессов излучения и результирующего уширения линий. Явление увеличения массы можно рассматривать как совершенно отдельную проблему, связанную главным образом с высокочастотным обрывом спектра колебаний, который, по крайней мере частично, ответствен за какие бы то ни было изменения массы осциллирующей частицы. С другой стороны, уширение линий есть нечто, касающееся только тех мод резонатора, частоты которых очень близки к частоте осциллятора, и нет никаких оснований сомневаться в трактовке причин этого процесса, несмотря на то что у нас еще достаточно пробелов в знании других, не связанных с ним процессов.



## 17. ЭКВИВАЛЕНТНЫЙ КЛАССИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Эту главу можно рассматривать как пролог к следующей или как краткий симбиоз некоторых мыслей, высказанных в гл. 13, где было показано (см § 13.7), что при определенных, но не слишком жестких условиях квантования система откликается на воздействие силы так, что отклик можно моделировать набором классических осцилляторов — по одному на каждый возможный переход между энергетическими уровнями. Импульсная функция отклика  $h(t)$ , введенная в (13.37), применима либо к системе, о которой известно, что до воздействия она находилась в стационарном состоянии, либо к ансамблю идентичных систем, предшествующая история которых привела к хаотизации фаз. В каждом случае поведение  $\langle x(t) \rangle$ , рассматривают ли его как отклик простой системы в  $n$ -м квантовом состоянии или как ту часть среднего отклика ансамбля, которая относится к заполненности  $n$ -го состояния, принимает вид

$$h_n(t) = \sum_l [f_{ln}/(m\omega_{ln})] \sin \omega_{ln}t, \quad (17.1)$$

где

$$f_{ln}/(m\omega_{ln}) = 2 |\langle l|x|n \rangle|^2/\hbar = 2 |M_{ln}^{(1)}|^2/\hbar, \quad (17.2)$$

а  $\omega_{ln} = (E_l - E_n)/\hbar$ . Набор классических осцилляторов, типичный из которых имеет массу  $m/\hbar$  и частоту  $\omega_{ln}$ , в общем дал бы такой же отклик.

Эквивалентность квантованной системы и набора классических осцилляторов сохраняется при приложении изменяющейся во времени силы, если только отклик линеен, что позволяет разложить действие силы на последовательность импульсов, каждый из которых вызывает отклик (17.1). Если возмущающая сила столь велика, что заполненность  $n$ -го квантового состояния существенно нарушается, или (что во многом то же самое) если не выполняется предположение о беспорядочности фаз [что приводит к изменению  $h_n(t)$ ], то применять это рассуждение не следует. Для того чтобы оценить серьезность высказанного, рассмотрим один-единственный переход между уровнями  $n$  и  $l$ , когда электрон возмущен электрическим полем  $E \cos \omega t$ , а  $\omega$  близко к  $\omega_{ln}$ . Полагая  $a_n = 1$ , а  $a_l = 0$  и используя соотношение (13.39), находим, как меняется  $a_l$ :

$$\dot{a}_l = (ieEM_{ln}^{(1)}/\hbar) e^{-i\omega_{ln}t} \cos \omega t \sim (1/2) i E p/\hbar e^{i\delta t}. \quad (17.3)$$

Здесь  $\delta = \omega - \omega_{ln}$ , а  $p = eM_{ln}^{(1)}$ ; быстро осциллирующей величиной мы пренебрегли.

Результирующая амплитуда колебаний  $a_l$  на частоте биений  $\delta$  равна  $1/2 E p/(\hbar \delta)$ , а критерий для продолжения применения условия (17.1), являющийся и критерием линейности отклика, состоит просто в том, что значение  $a_l$  не должно приближаться к единице:

$$E p \ll \hbar \delta. \quad (17.4)$$

Для атомной системы  $p$  представляет собой типичный дипольный момент, вызванный сдвигом электрона на расстояние, сравнимое с атомным радиусом, например на  $3,3 \cdot 10^{-30}$  см (1 дебай). При большой расстройке, например когда  $\delta$  равно частоте линии ( $\sim 4 \cdot 10^{15}$  с<sup>-1</sup> для оптического перехода  $10^{11}$  В·м<sup>-1</sup>. Это огромная наные процессы,  $E$  должно быть порядка бы в радиационном луче, напряженность поля — такая оказалась бы  $10^{19}$  Вт·м<sup>-2</sup>. Как бы это плотность мощности которого составляет  $10^{19}$  Вт·м<sup>-2</sup>. Как бы это ни было много, это значение не превышает плотности мощности (см. гл. 21), достижимой в коротких импульсах больших лазеров.

При таком уровне мощности фактический отклик каждой физической системы нелинеен, даже если не произойдет ее немедленно разрушения. Нелинейные эффекты сравнительно не трудно получить при гораздо меньшей мощности  $\omega_{ln}$ , требуемая плотность ройке. Так, при  $\delta$ , в  $10^5$  раз меньшей  $\omega_{ln}$ , требуемая плотность мощности составляет только  $10^8$  Вт·м<sup>-2</sup>. До изобретения лазеров для монохроматического излучения это значение было недостижимым. С появлением лазеров ситуация изменилась.

Если бы не было радиационных потерь (и, как следствие этого, спектральные линии были бы идеально узкими), соотношение (17.4) подходило бы для всех  $\delta$ , как бы малы они ни были. При условии точной настройки любое значение  $E$  было бы достаточным, чтобы вызвать нелинейные эффекты. Такое состояние не слишком отличается от экспериментальных условий, имеющих место при ядерных магнитном резонансе, где заполнение очень низких энергетических уровней может приводить к насыщению линии. Однако в спектроскопии на оптических частотах условие (17.4) перестает выполняться, когда  $\delta$  сравнимо с шириной линии и возможны лишь обычные значения  $E$ . В этом случае потери энергии на радиационные переходы ограничивают рост  $a_l$  и способствуют линейному отклику системы.

После создания лазеров плотности мощности излучения для возбуждения нелинейных эффектов оказались достижимыми, что вызвало соответствующий интерес к теории нелинейных оптических процессов, которые здесь не будут рассматриваться [1], но они показывают, что предположение о линейности для многих случаев полностью оправдано, а вместе с тем оправдано и использование эквивалентного классического осциллятора для описания процессов и для нахождения решения задачи. При предположении о линейности изменений заселенностей уровней члены  $a_n a_n^*$  столь малы, что



не нужно беспокоиться о переходах, включающих три (или более) уровня, таких, как последовательные переходы по лестнице уровней осциллятора (о чем говорилось в гл. 13).

Действительно, с этой точки зрения гармонический осциллятор ввиду равномерного распределения уровней представляет собой особо чувствительную систему. Чаще всего сильное возбуждение системы, находящейся на уровне  $n$ , излучением, точно настроенным на частоту  $\omega_{nl}$ , переводит ее на уровень  $l$ . Никакие последующие изменения, кроме возврата в прежнее состояние, невозможны, поскольку все другие, в принципе доступные, уровни оказываются неправильно расположенными по отношению к резонансу.

Системы с равноотстоящими уровнями, подобные неограниченному набору для гармонического осциллятора или набору из  $2s+1$  уровней для частицы со спином  $s$ , дают отклик, который имеет подчеркнута классические аналогии даже в случае сильных возбуждений, не поддающиеся точному теоретическому рассмотрению.

В других системах нелинейность выходит за пределы двух уровней при значительно более интенсивной возмущающей силе, такой, что соотношение (17.4) нарушается для целой цепочки связанных уровней. Тогда теоретически задача становится настолько трудной, что доступна только для хорошего компьютера. Промежуточный случай, однако, можно аппроксимировать рассмотрением только двух близких к резонансу действия возмущающей силы уровней. Это побуждает провести детальный анализ двухуровневой системы в следующей главе. Однако, чтобы проделать все в должном порядке, сначала получим некоторые следствия из теории эквивалентного классического осциллятора.

#### 17.1. ПРАВИЛО $f$ -СУММ

В гл. 13 было отмечено, что, когда импульс  $P$  приложен к квантованной системе (см. § 13.7), немедленный отклик системы можно рассчитать, если в зависящем от времени уравнении Шредингера пренебречь величиной  $V$  и, следовательно, рассматривать частицу как свободную. Более того, легко показать, что результат (13.30) означает, что  $P$  увеличивает ожидаемое значение импульса, в то время как положение остается неизменным, точно таким же, как для классической частицы.

Если единичный импульс приложен к системе, находящейся в состоянии  $n$ , то в соответствии с (17.1) мгновенный отклик скорости можно выразить как

$$\dot{h}_n(0) = \sum_l f_{ln}/m.$$

Именно это соответствует отклику классической частицы, который составляет  $1/m$ . Отсюда при замене реальной системы, в которой одна частица подвержена воздействию приложенной силы, набором эквивалентных осцилляторов, каждый из которых испытывает то же

силовое воздействие, сила осциллятора  $f_{ln}$ , фигурирующая в переходах с данного уровня  $n$  на другой уровень  $l$ , должна подчиняться правилу  $f$ -суммы:

$$\sum_l f_{ln} = 1. \quad (17.5)$$

У нас уже был пример с гармоническим осциллятором, в котором однородная сила может вызывать переходы с уровня  $n$  только на уровни  $n \pm 1$ , причем  $f_{n+1,n} = n+1$ ,  $f_{n-1,n} = -n$ . Очевидно, для него условие (17.5) выполняется.

Проверим правило в явной форме в другом легко исследуемом случае: частица, связанная с ограниченным участком прямой  $0 < x < a$ , в пределах которого  $V=0$ . Тогда  $n$ -я волновая функция (нормированная) будет иметь вид  $(2/a)^{1/2} \sin(n\pi x/a)$ , а ее энергия составит  $n^2(\pi^2\hbar^2/(2ma^2))$ . Следовательно,  $\omega_{ln} = \pi^2\hbar(l^2 - n^2)/(2ma^2)$  и

$$\begin{aligned} \langle l|x|n \rangle &= (2/a) \int_0^a x \sin(l\pi x/a) \sin(n\pi x/a) dx = \\ &= \begin{cases} -8nla/[\pi^2(l^2 - n^2)^2], & \text{если } l-n \text{ нечетно,} \\ 0, & \text{если } l-n \text{ четно.} \end{cases} \end{aligned} \quad (17.6)$$

Следовательно,  $f_{ln} = 64n^2l^2/[\pi^2(l^2 - n^2)^3]$ , если  $l-n$  нечетно. Оценим  $f_{ln}$  для переходов из состояния  $n=4$ :

| $l$      | 1       | 3       | 5      | 7      | 9      | 11     | 13     | 15     |
|----------|---------|---------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| $f_{ln}$ | -0,0307 | -2,7234 | 3,5581 | 0,1415 | 0,0306 | 0,0108 | 0,0049 | 0,0026 |

Она оказывается примерно равной 0,9954. Большие значения получают, если учесть отброшенные части дробей. Если бы рассматривались переходы из какого-либо другого состояния, то все значения  $f$ , разумеется, оказались бы другими. Однако сумма всегда равна единице.

Отметим, что, как и в случае гармонического осциллятора, некоторые из величин больше единицы, что указывает на отклик системы более сильный, чем для классического осциллятора, и что переходы вниз соответствуют отрицательной силе. Их вклад в функцию импульсного отклика противоположен по знаку вкладу связанной классической частицы, имеющей положительную массу.

Есть следствия, которые в последующем сыграют для нашего рассмотрения важную роль. Так, например, вклады переходов вверх и вниз в поляризацию молекулярной системы постоянным полем противоположны: переходы вверх дают рост положительной электрической восприимчивости, переходы вниз — отрицательной. Если функция отклика затухает (вследствие радиационных переходов или соударений), переходы вверх приводят к диссипации энергии, в то



время как переходы вниз — к отрицательной диссипации, или к выигрышу. Действие лазеров или мазеров зависит именно от этой смены знаков.

Правило  $f$ -сумм, выраженное соотношением (17.5), относится к одиночной частице, однако возможно обобщение на случай многих частиц. Рассмотрим обычный случай, а именно случай переходов электрического диполя, к которому приложена сила со стороны однородного электрического поля  $E$ . Разные частицы в сложной системе испытывают действие различных сил  $qE$  в соответствии с зарядом частиц  $q$ . Свободная частица с зарядом  $q_i$  и массой  $m_i$  под действием импульсного поля  $P_e = \int E dt$  откликается мгновенным изменением скорости  $P_e q_i / m_i$  и мгновенным изменением электрического тока  $P_e q_i^2 / m_i$ . Если отклик системы, находящейся в состоянии  $n$ , связан с набором классических осцилляторов, несущих заряд  $e$  и имеющих массы  $m / f_{in}$ , то

$$\sum_i f_{in} e^2 / m = \sum_i q_i^2 / m_i, \quad (17.7)$$

т. е.

$$\sum_i f_{in} = \sum_i (q_i / e)^2 (m_i / m).$$

Для системы, состоящей из  $N$  идентичных частиц, например электронов, естественно считать  $e$  и  $m$  зарядом и массой электрона соответственно. Тогда (17.7) принимает вид

$$\sum_i f_{in} = N.$$

Часто случается, что в системе, к которой применяется правило  $f$ -сумм, одни частицы более или менее свободны, например электроны проводимости в металле; другие слабо связаны (электроны вблизи потолка валентной зоны в полупроводниках); третьи — связаны (электроны внутренней оболочки атомов); четвертые — очень сильно связаны (отдельные нуклоны в ядре). Частоты соответствующих осцилляторов заполняют огромный интервал частот. Но если они попадают в хорошо разделенные полосы, то при рассмотрении низкочастотных явлений, вероятно, можно пренебречь вкладом высокочастотных осцилляторов. Структура ядра, например, мало влияет на проводящие свойства твердых тел. Часто ядра и внутренние электронные оболочки атома рассматриваются как единая бесструктурная заряженная частица — ионный остов атома. Однако общего правила, определяющего границы применения данного упрощения, нет. Поляризация атома или непроводящего твердого тела может подавляться эквивалентными осцилляторами низкой частоты, но внутренние оболочки часто вносят далеко не пренебрежимый вклад. Если спектр осциллятора усечен, то к результату всегда нужно подходить с осторожностью.

## 17.2. СТАТИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ

Типичному эквивалентному осциллятору, обладающему силой осциллятора  $f_{in}$  и характеристической частотой  $\omega_{in}$ , приписывают постоянную возвращающую силу  $\mu_{in}$ , равную  $m\omega_{in}^2 / f_{in}$ . Под действием стационарного поля  $E$  смещение будет  $eE / \mu_{in}$ , а результирующий дипольный момент системы —  $e^2 E / \mu_{in}$ . Следовательно, полный дипольный момент, приобретенный системой, находящейся в состоянии  $n$ , можно записать как

$$p = (e^2 E / m) \sum_i f_{in} / \omega_{in}^2. \quad (17.8)$$

Если указанная система представляет собой уединенный атом или молекулу, то молекулярная поляризуемость  $\alpha$  определяется уравнением  $p = \alpha \epsilon_0 E$ . В том случае, если в единице объема будет  $N$  молекул, поляризация единицы объема будет определяться выражением  $P = N \alpha \epsilon_0 E = \kappa \epsilon_0 E$ , где  $\kappa$  — объемная восприимчивость  $N \alpha^*$ .

Из соотношения (17.8) имеем

$$\alpha_n = (e^2 / m) \sum_i f_{in} / \omega_{in}^2. \quad (17.9)$$

Рассмотренный ранее пример с частицей, движущейся по ограниченному отрезку прямой, иллюстрирует этот результат. Вычислим поляризуемость в основном состоянии,  $n=1$ . Из (17.6) для четных  $l$  получаем  $f_{l1} = 64l^2 / [\pi^2(l^2 - 1)^3]$  и  $\omega_{l1} = (l^2 - 1) [\pi^2 \hbar^2 / (2ma^2)]$ . Отсюда следует

$$\begin{aligned} \alpha_0 &= \frac{256me^2a^4}{\pi^6\hbar^2} \sum_{\text{нечетные } l} \frac{l^2}{(l^2 - 1)^5} = \\ &= \frac{me^2a^4}{\pi^4\hbar^2} (42696663 + 54652 + 1778 + 167 + 27 + 6 + 2 + 1) \cdot 10^8 = \\ &= 0,42753296 me^2a^4 / (\pi^4 \hbar^2). \end{aligned} \quad (17.10)$$

Для непосредственного вычисления  $\alpha_0$  нужно решить уравнение Шредингера для потенциала  $V = -Ex$ , взяв волновую функцию лишь с точностью до членов первого порядка по  $E$ . Подстановкой можно проверить, что подходит следующее решение:

\* Строго говоря,  $E$  и  $P$  — векторы, а  $\kappa$  — тензор второго ранга. Нужно признать, что в трехмерном случае с матричным элементом  $\langle l|x|n \rangle$  следует обращаться, как с вектором  $\langle l|x|n \rangle$ , а  $f_{in}$  считать тензором второго ранга  $(2m\omega_{in}/\hbar) \langle l|x_i|n \rangle \langle l|x_j|n \rangle^*$ , придающим тензорную анизотропию обратной массе  $1/m_{in} = f_{in}/m$ . Это является осложнением, которое нужно учитывать во многих реальных вычислениях. Однако оно не затрагивает обсуждаемых здесь физических принципов.



$$\psi = (1 - \beta x) \sin kx + \beta kx^2 \cos kx. \quad (17.11)$$

Здесь  $\hbar^2 k^2 / (2m) = E$ , а  $\beta = eEma^2 / (2\pi^2 \hbar^2)$ .

Нули функции  $\psi$  не попадают в точности в 0 и  $a$ , а находятся в точках 0 и  $X (= a(1 - \beta a))$ . Это, однако, не суть важно, поскольку для вычислений  $\langle x \rangle$  до и после приложения  $E$  используется тот же самый отрезок прямой. Разность этих значений приводит к правильному с точностью до членов первого порядка по  $E$  значению  $a$ .

Из (17.11) находим  $\int_0^X \psi^2 dx = 1/2 a(1 - 2\beta a)$  и  $\int_0^X x \psi^2 dx = 1/4 a^2 [1 - (10/3 - 5/\pi^2) \beta a]$ . Следовательно, после приложения поля  $E$

$$\langle x \rangle = \frac{\int_0^X x \psi^2 dx}{\int_0^X \psi^2 dx} = 1/2 a [1 - (4/3 - 5/\pi^2) \beta a],$$

в то время как при  $E=0$   $\langle x \rangle = 1/2 X$ . Сдвиг составляет  $1/2 \beta a^2 (5/\pi^2 - 1/3)$ , а отсюда в соответствии с (17.10)

$$\alpha = [me^2 a^4 / (\pi^4 \hbar^2)] (5/4 - \pi^2/12) = [me^2 a^4 / (\pi^4 \hbar^2)] 0,42753297.$$

Вид соотношения (17.10) вызывает искушение сделать заключение, что переход на следующий уровень настолько доминирует в  $\alpha$  над всеми другими переходами, что ими можно пренебречь, если только не требуется большая точность. Это искушение усиливается, когда мы применим указанный принцип для гелия, у которого резонансная линия с длиной волны 59 нм соответствует возбуждению одного электрона с уровня  $1s$  на уровень  $2p$  (вследствие симметрии для перехода  $1s-2s$   $f$  равна нулю). Если предположить, что этот переход обеспечивает единственный эквивалентный осциллятор с  $f$ , близкой к единице, то расчетное значение объемной восприимчивости  $\kappa$  при нормальных условиях окажется  $8,4 \cdot 10^{-5}$ , что весьма близко к измеренному значению  $7 \cdot 10^{-5}$ . Однако те же рассуждения применительно к ксенону, резонансная линия которого составляет 124 нм, привели бы к значению  $\kappa$ , в четыре раза большему, чем для гелия, тогда как фактически оно в 20 раз больше. Очевидно, большее число электронов в атоме приводит к значительно большей плотности возбужденных состояний, что даже при малых индивидуальных вкладах приводит к ошеломляющему итогу.

Еще одно предостережение возникает при вычислении значений  $f$  для переходов водорода из основного состояния  $1s$  в более высокие состояния  $2p$ ,  $3p$  и т. д., которые являются единственно возможными переходами, так как для них  $f$  не обращается в нуль. В этом случае волновые функции хорошо известны, но непосредственное интегрирование громоздко [2]. Оказывается, что  $f_{21} = 0,4162$ ,  $f_{31} = 0,0791$ ,  $f_{41} = 0,0290$ , ..., а сумма  $\sum_{n=2}^{\infty} f_{n1} = 0,5641$ . В этом случае  $f$ -сумма не равна единице потому, что при расчете не учтен кон-

тинуум несвязанных состояний с положительной энергией; ясно, что именно они поставляют почти половину в значение силы осциллятора.

Эти примеры приведены для того, чтобы еще раз подчеркнуть, сколь осторожно нужно поступать, ограничивая набор осцилляторов. Учет самых нижних состояний позволяет лишь оценить порядок величины  $\alpha$ , но если стремиться к точности, то ограничения недопустимы.

Следует учитывать, что при вычислении статической поляризуемости не отдается предпочтения определенным эквивалентным осцилляторам, возбуждаемым вблизи резонанса, кроме тех, которые из-за наличия  $\omega_{in}^2$  в знаменателе соотношения (17.9) делают переходы с низкой энергией наиболее важными. Однако, как только мы займемся резонансными откликами, мы сможем сузить рассмотрение (как мы уже делали), с тем чтобы исключить все уровни, для которых вероятности переходов незначительны.



## 18. ДВУХУРОВНЕВАЯ СИСТЕМА

Применим результаты, полученные в предыдущей главе, к более подробному рассмотрению системы, в которой заметно заполнены только два уровня. Так, например, при протонном спиновом резонансе в идеальном случае все поступательные состояния протона несущественны, так как магнитное поле, вызывающее переходы между основными состояниями, на них не действует. Другой пример: частица, осуществляющая туннельные переходы между двумя ямами. В этом случае два самых нижних энергетических состояния гораздо ближе друг к другу, чем другие состояния возбуждения. Поэтому для изменения заселенности этих самых нижних уровней используется только излучение низких частот.

Пренебрегая всеми остальными частотами, мы вовсе не считаем, что они не существуют. Так, например, мы не учитываем интенсивность колебаний, связанных с переходами между рассматриваемыми состояниями, мы просто игнорируем их, определяя состояние системы двумя комплексными амплитудами  $a_1$  и  $a_2$  собственных функций  $\chi_1(\mathbf{r})$  и  $\chi_2(\mathbf{r})$ , взятых как действительные функции. В любой момент волновая функция принимает вид

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = a_1 \chi_1 e^{-iE_1 t/\hbar} + a_2 \chi_2 e^{-iE_2 t/\hbar}. \quad (18.1)$$

Здесь  $E_2 > E_1$ . Если  $E_2 - E_1 = 2\Delta_0$ , то резонансная частота равна  $2\Delta_0/\hbar$ . Под действием возмущающих сил  $a_1$  и  $a_2$  со временем меняются.

Однако если волновая функция первоначально пронормирована, то всегда

$$a_1 a_1^* + a_2 a_2^* = 1.$$

Удобной моделью для обсуждения является одномерная система из двух ям, для которой функции  $\chi_1$  и  $\chi_2$  зависят только от  $y$ . Большую часть результатов можно выразить через параметры трех характеристических дипольных моментов:

$$\begin{aligned} p_1 &= \langle 1 | ey | 1 \rangle, \\ p_2 &= \langle 2 | ey | 2 \rangle, \\ p_{12} &= \langle 2 | ey | 1 \rangle. \end{aligned} \quad (18.2)$$

При использовании этих соотношений оказывается, что результаты весьма мало зависят от деталей модели, что и отвечает положению вещей. Частный случай двухуровневой системы рассматривается

для упрощения уравнений и облегчения их интерпретации. Но это не мешает нам применить полученные результаты к более широкому кругу вопросов, в том числе и к спиновому резонансу. Следует, однако, заметить, что, несмотря на практическое значение этого вопроса, мало что удастся добавить, за исключением некоторого обоснования классической трактовки, о которой мы говорили в гл. 8 (см. § 8.4).

### 18.1. ОБЩАЯ ТЕОРИЯ

При наложении параллельно  $y$  переменного во времени электрического поля  $E(t)$  амплитуды колебаний  $a_1$  и  $a_2$  в соответствии с (13.40) меняются следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \dot{a}_1 &= (i\varepsilon/\hbar)(p_1 a_1 + p_{12} a_2 e^{-2i\Delta_0 t/\hbar}), \\ \dot{a}_2 &= (i\varepsilon/\hbar)(p_2 a_2 + p_{12} a_1 e^{2i\Delta_0 t/\hbar}). \end{aligned} \right\} \quad (18.3)$$

Поле, меняющееся по закону косинуса  $\varepsilon \cos \omega t$ , можно записать так:  $\frac{1}{2}\varepsilon(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})$ . Тогда каждое уравнение будет содержать величины, включающие три частоты, а именно:  $|\omega|$  и  $|\omega \pm 2\Delta_0/\hbar|$ . Вблизи резонанса в сигналах  $a_1$  и  $a_2$  преобладает самое медленное колебание  $|\omega - 2\Delta_0/\hbar|$ , другие частоты приводят к быстрым осцилляциям с малыми амплитудами. Если ими пренебречь, то получаемые при этом варианты системы уравнений (18.3) легко поддаются решению. Вводя обозначения  $\delta = \hbar\omega/2\Delta_0 - 1$ ,  $\delta_0 = p_{12}\varepsilon/(2\Delta_0)$  и  $\tau = 2\Delta_0 t/\hbar$ , имеем

$$da_1/d\tau = \frac{1}{2}i\delta_0 a_2 e^{i\delta\tau} \quad \text{и} \quad da_2/d\tau = \frac{1}{2}i\delta_0 a_1 e^{-i\delta\tau}. \quad (18.4)$$

Подставив пробные решения

$$a_1 = c_1 e^{i\tau}, \quad a_2 = c_2 e^{i(\tau-\delta)\tau}, \quad (18.5)$$

получаем  $\gamma(\gamma - \delta) = \frac{1}{4}\delta_0^2$  или  $\gamma = \frac{1}{2}[\delta \pm (\delta^2 + \delta_0^2)^{1/2}]$

и

$$c_2/c_1 = 2\gamma/\delta_0. \quad (18.6)$$

Оба решения (18.5) удобно записать в виде

$$\begin{cases} a_1 = e^{i\tau}, & a_2 = 2(\gamma_1/\delta_0) e^{i\tau}, \\ a_1 = e^{-i\tau}, & a_2 = -(2\gamma_2/\delta_0) e^{-i\tau}. \end{cases} \quad (18.7)$$

Здесь  $\gamma_1 = \frac{1}{2}[(\delta^2 + \delta_0^2)^{1/2} + \delta]$ , а  $\gamma_2 = \frac{1}{2}[(\delta^2 + \delta_0^2)^{1/2} - \delta]$ .

Общее решение представляет собой линейную комбинацию частных решений:

$$\begin{cases} a_1 = C_1 e^{i\tau_1\tau} + C_2 e^{-i(\tau_1\tau + \varphi)}, \\ a_2 = (2/\delta_0)[C_1 \gamma_1 e^{i\tau_1\tau} - C_2 \gamma_2 e^{-i(\tau_1\tau + \varphi)}]. \end{cases} \quad (18.8)$$

Так как абсолютные значения фаз в выражениях для  $a_1$  и  $a_2$  не играют роли, то  $C_1$  и  $C_2$  можно считать действительными, а  $\varphi$  — произвольной фазой. Условие нормировки имеет вид  $a_1 a_1^* + a_2 a_2^* = 1$ . Следовательно,

$$\gamma_1 C_1^2 + \gamma_2 C_2^2 = \delta_0^2/(4\delta'), \quad (18.9)$$

где

$$\delta' = \gamma_1 + \gamma_2 = (\delta^2 + \delta_0^2)^{1/2}.$$



Дипольный момент, соответствующий общему решению, получают без труда:

$$\langle p \rangle = e \langle y \rangle = a_1 a_1^* p_1 + a_2 a_2^* p_2 + (a_1 a_2^* e^{i\tau} + a_2 a_1^* e^{-i\tau}) p_{12}. \quad (18.10)$$

Первые два члена в (18.10) не будут колебательными, если только

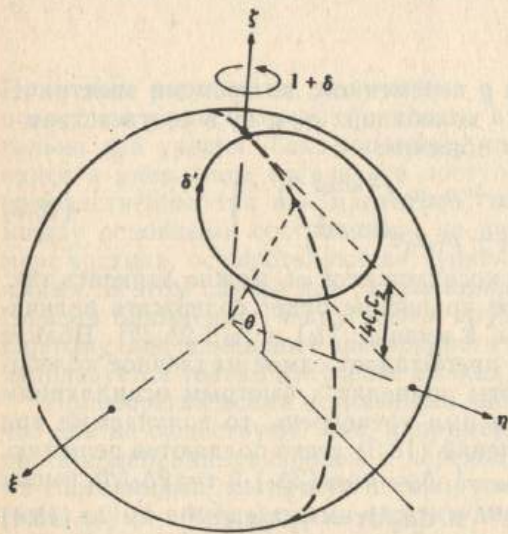


Рис. 18.1. Геометрическое представление соотношения (18.11) в виде проекции на горизонтальную плоскость ( $\xi, \eta$ ) вращательного движения по круговой орбите на поверхности сферы

пользуя соотношение (18.9):

$$\langle p \rangle / p_{12} = \text{Re} [e^{i(1+\delta)\tau} \{ (\delta_0 / \delta')^2 - (4C_1 C_2)^2 \}^{1/2} + (4C_1 C_2 / \delta_0) (\gamma_1 e^{-i(\delta'\tau + \varphi)} - \gamma_2 e^{i(\delta'\tau + \varphi)})]. \quad (18.11)$$

Этот результат имеет простую геометрическую интерпретацию (рис. 18.1). Выражение в фигурных скобках дает на комплексной плоскости эллиптическую траекторию — проекцию равномерного движения на наклонную окружность. Радиус окружности и ее наклон можно определить через большую и малую полуоси эллипса  $(4C_1 C_2 / \delta_0) (\gamma_1 \pm \gamma_2)$ . Его центр находится в точке  $[(\delta_0 / \delta')^2 - (4C_1 C_2)^2]^{1/2}$ . Нетрудно показать, что окружность является сечением сферы единичного радиуса плоскостью под углом  $\theta = \arctg(\delta / \delta_0)$ , а вертикальный сдвиг составляет  $4C_1 C_2$ . Типичная точка относительно медленно движется по окружности с угловой

скоростью  $\delta'$ , в то время как вся картина осциллирует на ведущей частоте  $1 + \delta$ .  $\xi$ -Координата точки равна  $\langle p \rangle / p_{12}$ . Она гармонически колеблется с частотой, близкой к частоте биений  $(E_2 - E_1) / \hbar$ , и амплитудой, которая моделируется колебаниями с частотой, близкой к частоте расстройки  $\delta$ , или, точнее,  $\delta'$ . Это поведение в точности совпадает с поведением, описанным в гл. 8 и проиллюстрированным рис. 8.7, на котором изображено движение гиромагнитного волчка в постоянном вертикальном магнитном поле, возмущенном в горизонтальной плоскости слабым колеблющимся или вращающимся полем (см. § 8.4).

Точность этой аналогии позволяет, как и в случае гармонического осциллятора, рассмотреть данное явление, применяя классические преобразования там, где, казалось бы, имеет место исключительно квантовое явление спинового резонанса.

Графическое представление уравнения (18.11) (рис. 18.1) приобретает новый смысл, если перейти к декартовым координатам. Пусть для любого момента времени волновая функция  $\Psi$  выражается суммой  $a_1 \chi_1 + a_2 \chi_2$ , где  $a_1$  и  $a_2$  содержат фазовый множитель  $e^{-iE_{12}t/\hbar}$ , и пусть эта волновая функция на сфере единичного радиуса соответствует точке, определенной следующим образом:

$$\zeta = a_2 a_2^* - a_1 a_1^*, \quad \rho = \xi + i\eta = 2a_1 a_2^*. \quad (18.12)$$

Тогда верхний полюс сферы ( $\zeta = 1$ ) представляет возбужденное, а нижний ( $\zeta = -1$ ) — основное состояние, а азимутальный угол любой другой точки даст мгновенную разность фаз между ними. Волновая функция, естественно, нормирована:  $a_1 a_1^* + a_2 a_2^* = 1$ .

Из последнего слагаемого в (18.10) следует, что из-за наличия множителя  $e^{i\tau}$ , содержащегося в  $a_1 a_2^*$ , координата  $\xi$  определяет  $\langle p \rangle / p_{12}$ ; развитие  $a_1$  и  $a_2$  заставляет точку перемещаться в соответствии с (18.11). Особенность модели спинового резонанса по сравнению с моделью из двух потенциальных ям, которая также описывается простой волновой функцией двух переменных, состоит в том, что здесь используется не только  $\xi$ -компонента, но и декартовы координаты. По существу, мы придали квантовой теории спина образное воплощение, которое удовлетворяет несравненно большему кругу интересов.

Матрицы Паули [1]

$$\sigma_\xi = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_\eta = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_\zeta = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

позволяют рассчитывать ожидаемые значения всех трех компонент углового момента в том же виде, что и (18.12):

$$\langle L_\xi \rangle = \frac{\hbar}{2} (a_1^* a_2^*) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (a_1^* a_2 + a_1 a_2^*),$$

$$\langle L_\eta \rangle = \frac{\hbar}{2} (a_1^* a_2^*) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = -\frac{i\hbar}{2} (a_1^* a_2 - a_1 a_2^*),$$



$$\langle L_z \rangle = \frac{\hbar}{2} (a_1^* a_2^*) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (a_1 a_1^* - a_2 a_2^*).$$

Теперь при описании протонного резонанса уже не нужно более детально обосновывать применение классической аргументации гл. 8, и мы по-прежнему будем опираться на нее в тех случаях, когда это будет необходимо. Мы больше не будем рассматривать частицы со спином, не равным  $1/2$ , для которых число равноудаленных уровней больше двух и которые являются связующим звеном между частицами со спином  $1/2$  (двухуровневыми) и гармоническими осцилляторами (имеющими неограниченное число уровней).

### 18.2. МОДЕЛЬ ДВУХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ЯМ

Теперь уместно обратиться к модели с двумя близко расположенными уровнями. Эта модель формально ближе к системам, рассматриваемым в большей части этой и следующих глав, чем частица со

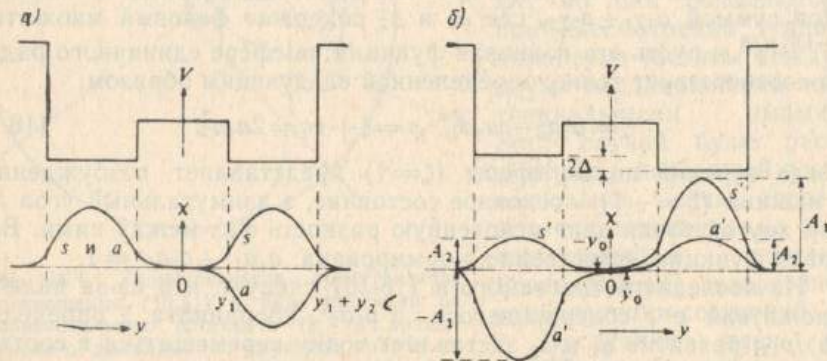


Рис. 18.2. Модель двух потенциальных ям:

$a$  — одинаковым ямам (вверху) соответствуют симметричная и антисимметричная волновые функции (внизу);  $b$  — для неодинаковых ям волновая функция нижнего состояния ( $s'$ ) имеет большую амплитуду в более глубокой яме, волновая функция верхнего состояния ( $a'$ ) имеет большую амплитуду в менее глубокой яме

спином  $1/2$ . Сначала рассмотрим систему, изображенную на рис. 18.2,  $a$ , в которой одномерные потенциальные ямы имеют одинаковую глубину и ширину. Если барьеры достаточно высоки и широки, чтобы предотвращать туннелирование, то ямы не связаны. В каждой из них волновая функция основного состояния может содержать произвольные амплитуды. Однако если ямы связаны возможностью туннелирования, то имеется два расположенных низко стационарных состояния — одно симметричное (четное), другое антисимметричное (нечетное), причем первое имеет меньшую энергию, чем второе.

Внутри ям волновая функция  $\chi$  представляет собой синусоиду, по внешним краям — экспоненту, а внутри барьера имеет форму  $\text{ch}(\mu y)$  для четного случая и  $\text{sh}(\mu y)$  — для нечетного;  $\mu$  определяет

высоту барьера. Так как  $\chi$  распространяется за пределы ямы, длина полуволны синусоиды внутри нее оказывается чуть больше, чем ее ширина  $y_2$ . С очень хорошим приближением этот малый избыток можно считать суммой значений  $\chi/\chi'$  на краях, т. е. линейно экстраполировать синусоиду к нулю и принять за эффективный край точку, в которой  $\chi$  касается оси. С внешней стороны стенок избыток постоянен и им можно пренебречь. Однако изменение избытка на внутренней стороне стенок, зависящее от вероятности туннелирования, является причиной сдвига энергетических уровней. Это составляет основную особенность данной модели. Таким образом, если внутри барьера  $\chi = \text{ch}(\mu y)$ , то у его края ( $y = y_1$ ) величина  $\chi/\chi'$  скорее принимает значение  $\text{cth}(\mu y_1)/\mu$ , а не  $1/\mu$ , которое было бы в случае непроницаемого барьера при больших  $y_1$ . Поэтому туннелирование увеличивает эффективную ширину в  $\text{cth}(\mu y_1) - 1$  раз и соответственно понижает кинетическую энергию четного состояния.

Эта энергия составляет  $\hbar^2 k^2 / (2m)$  для синусоидальной волновой функции с волновым числом  $k$ . Следовательно,

$$\Delta E/E = 2\Delta k/k = -2 [\text{cth}(\mu y_1) - 1] / (\mu y_2),$$

где  $y_2$  — ширина ямы. В противоположность этому эффективная ширина для нечетных состояний уменьшается, так как крутизна  $\text{sh}(\mu y)$  больше крутизны  $e^{\mu y}$ , а энергия возрастает почти во столько же раз. Таким образом, уровни по отношению к уровням несвязанных ям отличаются на  $\pm \Delta_0$ , где

$$\Delta_0 = C [\text{cth}(\mu y_1) - 1] \quad \left. \begin{array}{l} \text{или } C [1 - \text{th}(\mu y_1)] \end{array} \right\} \sim 2C e^{-2\mu y_1} \quad (18.13)$$

и

$$C = \pi^2 \hbar^2 / (\mu m y_2^3).$$

Если в начальный момент времени система представляла собой смесь двух состояний, то биения волновой функции приведут к синусоидальному обмену частицы между ямами. Этот обмен совершается с частотой  $2\Delta_0/\hbar$ , т. е.  $[\pi^2 \hbar^2 / (\mu m y_2^3)] e^{-2\mu y_1}$ .

С классической точки зрения, коэффициент при экспоненциальном члене, рассматриваемый в отдельности от постоянной порядка единицы, — это частота, с которой частица, обладающая такой же энергией, ударяется о внутренний край ямы. Экспоненциальный же член — это вероятность проникновения сквозь барьер при каждой попытке (строго говоря, уменьшение амплитуды при прохождении барьера). Но это не более чем мнемонические рассуждения.

Если потенциальные ямы неодинаковы, как на рис. 18.2,  $b$ , то центр волновой функции в барьере смещается из начала координат в некоторое новое положение  $y_0$ . Сейчас уместнее синтезировать решение и затем определить, какая же задача оказалась решенной. Например, допустим, что четное решение модифицировано так, что волновая функция в барьере имеет вид  $\text{ch}[\mu(y + y_0)]$ , ее минимум смещен от центра на  $-y_0$ . Та же аппроксима-



ция, что приводит к (18.13), теперь дает иной сдвиг для кинетической энергии в обеих ямах, а именно  $-2Ce^{-2\mu(y_1 \pm y_0)}$  или  $-\Delta_0 e^{\pm 2\mu y_0}$ . Здесь верхний знак относится к левой яме, кинетическая энергия которой меньше, чем правой. Разность кинетических энергий должна компенсироваться разностью потенциальных энергий  $2\Delta$ , из чего следует, что это решение имеет место при  $2\Delta = \Delta_0(e^{2\mu y_0} - e^{-2\mu y_0})$ . Следовательно,

$$\Delta = \Delta_0 \operatorname{sh}(2\mu y_0). \quad (18.14)$$

Полное снижение энергии получается суммированием кинетического и потенциального вкладов в каждую яму. Таким образом, для правой ямы энергия оказывается равной  $-\bar{E}$ , причем

$$E = \Delta + \Delta_0 e^{-2\mu y_0} = \Delta_0 \operatorname{ch}(2\mu y_0) = (\Delta_0^2 + \Delta^2)^{1/2}. \quad (18.15)$$

В верхнем состоянии, для которого волновая функция внутри барьера имеет вид  $\operatorname{sh}[\mu(y + y_0)]$ , энергия составляет  $+E$ .

Волновая функция в яме столь близка к синусоиде, что для определения амплитуды в каждой яме достаточно одного-единственного члена. Из того, что градиент синусоиды при ее приближении к нулю определяется амплитудой синусоиды, следует: значения  $\chi'$  на внутренних краях ям определяют относительные амплитуды. Если их значения в том случае, когда система находится в нижнем состоянии, составляют  $A_1$  для правой ямы и  $A_2$  — для левой, то в верхнем состоянии они будут соответственно  $A_2$  и  $A_1$ . При этом

$$\left. \begin{aligned} A_1/A_2 = \operatorname{sh}[\mu(y_1 + y_0)]/\operatorname{sh}[\mu(y_1 - y_0)] \\ \text{или } \operatorname{ch}[\mu(y_1 + y_0)]/\operatorname{ch}[\mu(y_1 - y_0)] \end{aligned} \right\} \sim e^{2\mu y_0} = \frac{E + \Delta}{\Delta_0} = \frac{\Delta_0}{E - \Delta}. \quad (18.16)$$

Следовательно,

$$A_1^2/A_2^2 = (E + \Delta)/(E - \Delta), \quad (18.17)$$

или

$$A_1 = (1 + \Delta/E)^{1/2}/\sqrt{2} \quad \text{и} \quad A_2 = (1 - \Delta/E)^{1/2}/\sqrt{2}, \quad (18.18)$$

если амплитуды нормированы так, что  $A_1^2 + A_2^2 = 1$ .

Теперь можно связать дипольный момент, определенный соотношением (18.2), с эталонным моментом  $p_0$ , получаемым при помещении заряда в центре одной из ям. Тогда

$$\left. \begin{aligned} p_1 = -p_2 = p_0(A_1^2 - A_2^2) = p_0\Delta/E, \\ p_{12} = 2p_0A_1A_2 = p_0\Delta_0/E. \end{aligned} \right\} \quad (18.19)$$

Для одинаковых ям  $p_1$  и  $p_2$  обращаются в нуль, а  $p_{12} = p_0$ . Когда ямы неодинаковы, то

$$p_1^2 + p_{12}^2 = p_0^2. \quad (18.20)$$

Результаты, выражаемые соотношениями (18.15), (18.16) и (18.17), совпадают по форме с теми, что получены для связанных резонансных контуров (см. § 12.1). Очевидно, соотношение (18.15) следует сравнивать с (12.11) (см. рис. 12.2), заменив частоты в контурах энергиями системы из двух потенциальных ям. Вероятность туннелирования, измеряемая величиной  $\Delta_0$ , является аналогом величины  $k$  — параметра связи для контуров. Таким же образом точно соответствуют друг другу отношение запасов энергий обоих контуров при возбуждении чисто нормальной моды [соотношение (12.10)] и отношение вероятностей нахождения частицы в обеих ямах, записанное в форме (18.17).

Ни в случае контуров, ни в случае двойной ямы полученные результаты не зависят от деталей каждой из систем. Форма потенциальных ям не играет роли: достаточно, чтобы они принимали одинаковую форму, за исключением вертикального смещения, и чтобы связь была слабой [2]. Формы ям могут быть даже идентичными, если только при определении амплитуд  $A_{1,2}$  учтено, что квадраты их представляют собой вероятности нахождения частицы в каждой яме.

### 18.3. ФУНКЦИИ ОТКЛИКА

Наложение однородного электрического поля  $E$  приводит к линейному изменению потенциала двойной ямы. Наклон дна каждой ямы имеет второстепенное значение по сравнению со смещением средних уровней, и воздействие поля можно адекватно описать заменой  $p$  на  $p_0E$ .

Если система первоначально находилась в своем нижнем состоянии и способна после наложения  $E$  вернуться в это состояние, то ее дипольный момент изменяется на  $\delta p_1$ , что, как следует из (18.19), составляет  $p_0^2\Delta_0^2E/E^3$ . Для верхнего состояния результат оказывается таким же, только с другим знаком. Поэтому чистые состояния имеют поляризуемости

$$\bar{\alpha} = \pm p_0^2\Delta_0^2/E^3. \quad (18.21)$$

Верхний знак относится к верхнему состоянию. Для одинаковых ям (18.21) становится  $\mp p_0^2/\Delta_0$ , что является условием максимальной поляризуемости.

Здесь легкоприменимы аргументы, приведенные в последней главе. Существует только одна значимая величина  $f$ , а постоянная силы для эквивалентного осциллятора составляет  $E/\langle 2|y|1 \rangle^2$ , т. е.  $e^2E/p_{12}^2$ , давая поляризуемость  $p_{12}^2/E$ . Соотношение (18.21) аналогично соотношению (18.19).

По мере уменьшения связи между одинаковыми ямами  $E$  уменьшается, в то время как  $p_{12}$  остается постоянным, а  $\alpha$  неограниченно возрастает. В соответствии с (17.2)  $f_{12}$  составляет  $4m\Delta_0p_{12}^2/(\hbar^2e^2)$ , что примерно равно множителю, отвечающему за туннелирование  $e^{-2\mu y_1}$ , и поэтому очень мала. Здесь мы имеем пример того, как



в подавляющем большинстве случаев наиболее значительный эквивалентный осциллятор может рассчитывать только на малую интенсивность колебаний. Его значимость определяется малой частотой и, следовательно, его слабой силовой константой.

Результат, выражаемый соотношением (18.21), подходит только для чистых состояний. Ансамбль идентичных систем, находящихся в тепловом равновесии, обладает средней поляризуемостью  $\bar{\alpha}$ , определяемой превалированием числа систем в низшем состоянии над числом систем в высшем состоянии, так как оба состояния имеют равные и противоположные поляризуемости. При малых  $\Delta_0$  вклад отдельных высоких значений  $\alpha$  с избытком компенсируется небольшим превалированием систем в нижнем состоянии и фактически  $\bar{\alpha}$  имеет тенденцию быть независимой от  $\Delta_0$ .

Предположим, что до приложения  $E$  половине систем соответствуют разные ямы одного знака  $\Delta$ , а половине — обратного знака  $-\Delta$ , вследствие чего результирующий полный дипольный момент равен нулю. Рассмотрим только правую половину системы  $e^{+E/(k_B T)} \times \times (e^{E/(k_B T)} + e^{-E/(k_B T)})^{-1}$ , части которой могут находиться в двух состояниях, давая средний момент

$$\bar{p}/p_0 = (\Delta/E) \operatorname{tg} [E/(k_B T)]. \quad (18.22)$$

Продифференцировав и положив  $d\Delta/dE$  равной  $p_0$ , получим

$$\begin{aligned} \bar{\alpha} &= d\bar{p}/dE = p_0^2 d(p/p_0)/d\Delta = \\ &= p_0^2 \{ (\Delta_0^2/E^3) \operatorname{th} [E/(k_B T)] + [\Delta^2/(E^2 k_B T)] \operatorname{sech}^2 [E/(k_B T)] \}. \end{aligned} \quad (18.23)$$

Аналогичный результат получается и для второй половины ансамбля. Поэтому (18.23) справедливо для всего ансамбля. Два члена в фигурных скобках указывают на два очевидных источника поляризации полем. Первый отражает поляризуемость каждого состояния (18.21), уменьшенную множителем  $\operatorname{th} [E/(k_B T)]$ , который представляет собой избыточную долю систем, находящихся в более низком состоянии. Второй возникает вследствие изменения  $E$  и, следовательно, при приложении  $E$  определяется постоянной Больцмана.

В то время как дипольный момент, обязанный своим происхождением первому члену выражения, возникает практически мгновенно, поскольку энергетические уровни устанавливаются достаточно быстро, второй дипольный момент зависит от количества систем, совершающих переходы между состояниями, и, следовательно, от времени установления нового состояния статистического равновесия. Если системы изолированы от посторонних возмущений и их состояние зависит только от процессов излучения, то может пройти значительное время, прежде чем второй член проявит себя.

Однако здесь допущено слишком большое упрощение из-за предположения, что первый процесс происходит мгновенно: ясно, что внезапное наложение слабого поля не тотчас же изменит заселенность уровней и поэтому полный дипольный момент не претерпит

внезапного изменения. При наложении  $E$  системы, находившиеся в низшем состоянии с определенными значениями  $A_1$  и  $A_2$ , описываемыми (18.18), теперь сами окажутся в состоянии с одними и теми же значениями  $A_{1,2}$ , которые больше не подходят для стационарного состояния с измененным  $\Delta$ .

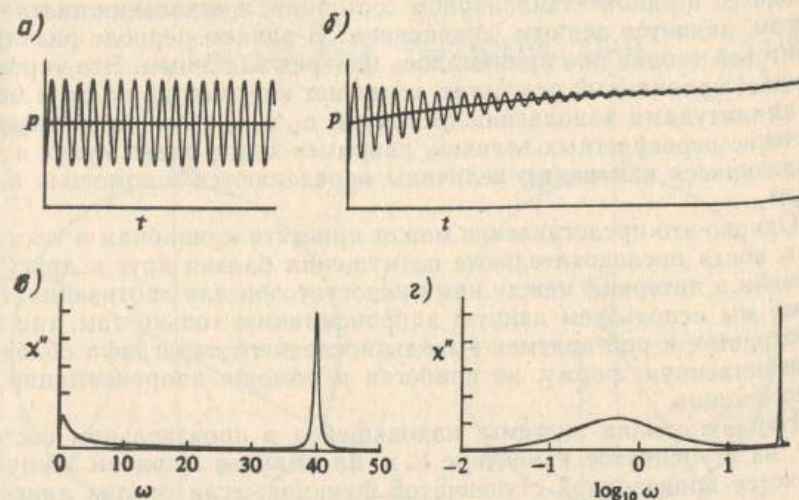


Рис. 18.3. Функция ступенчатого отклика дипольного момента системы с двумя потенциальными ямами при отсутствии диссипации (а); б — функция ступенчатого отклика для системы с двумя неодинаковыми потенциальными ямами и диссипацией; в — отвечающая за потери часть  $f(\omega)$ , полученная из б в соответствии с выражением (18.64) (соответствие масштабов амплитуд обоих пиков не соблюдено); г — тот же случай, что и в, но с использованием логарифмического масштаба — зависимость от  $\log \omega$  введена для того, чтобы подчеркнуть симметричность формы (но не разницу ширины) релаксационного (слева) и резонансного (справа) пиков

В этом новом смешанном состоянии дипольные моменты систем имеют малую колебательную компоненту на частоте  $2E/\hbar$ , а системы, первоначально находившиеся в высшем состоянии, также приобретают колебательный момент на той же частоте, но с противоположной фазой. Различие в числе систем, находящихся в каждом из двух состояний, ведет к избыточному вкладу со стороны более низких состояний. По этой причине после наложения поля  $E$  дипольный момент будет совершать колебания, как показано на рис. 18.3, а, начиная с того же, что и прежде, значения  $E$ , но возле нового среднего значения, которое выражается первым членом выражения (18.23). Со временем колебания заглушаются радиационными процессами или сглаживаются другими возмущениями. В то же время переходы восстанавливают равновесие ансамбля и вводят в действие второй член выражения (18.23). Последний процесс, как будет показано в дальнейшем, обычно происходит не с той же скоростью, что и затухание колебаний. Поведение, показанное на рис.



18.3, б, может считаться типичным для отклика дипольного момента на ступенчатое изменение  $E$  — это экспоненциально затухающее колебание возле базовой линии, которая сама экспоненциально стремится к постоянному уровню.

Физическое представление о системах, часть которых полностью находится в одном стационарном состоянии, а остальная часть — в другом, является ценным упрощением. В раннем периоде развития квантовой теории оно принималось наперед заданным. Это упрощение дает правильный результат, когда нет корреляции по фазе между амплитудами заполнения состояний  $a_1$  и  $a_2$ , поскольку среднее значение перекрестных величин, например  $a_1 a_2^*$ , равно нулю, а все подпадающие измерению величины определяются с помощью  $a_1 a_1^*$  и  $a_2 a_2^*$ .

Однако это представление может привести к ошибкам в тех случаях, когда последовательные возмущения близки друг к другу по времени и интервал между ними недостаточен для хаотизации. Поэтому мы используем данную аппроксимацию только там, где это необходимо, и постараемся выводы последнего параграфа облечь в количественную форму, не прибегая к помощи аппроксимации до самого конца.

Найдем отклик системы, находящейся в произвольном состоянии, на ступенчатое изменение  $E$  и на импульс (причем импульс является производной ступенчатой функции, если отклик линеен). Для этого случая, а также и для других вытекающих из него задач подходит геометрическое представление состояния системы, изображенное на рис. 18.1. Однако, для того чтобы его можно было применить к таким случаям, как неодинаковая двойная яма, оно нуждается в обобщении. Если полюсы сферы по-прежнему представляют чисто стационарные состояния, то нужно учитывать постоянные дипольные моменты систем.

Интерпретация величин  $\zeta$  и  $\rho$  в соотношении (18.12) остается той же, однако движение типичной точки нужно пересчитать с помощью (18.3), в котором  $p_2$  в соответствии с (18.19) следует положить равным  $-p_1$ . Тогда

$$\dot{a}_1 = (iE/\hbar)(p_1 a_1 + p_{12} a_2 e^{-i\omega_0 t})$$

и

$$\dot{a}_2 = (iE/\hbar)(-p_1 a_2 + p_{12} a_1 e^{i\omega_0 t}).$$

Здесь  $\omega_0 = 2E/\hbar$ . Отсюда следует, что

$$\dot{\zeta} = \dot{a}_2 a_2^* - \dot{a}_1 a_1^* + \text{const} = -2p_{12} E \eta / \hbar. \quad (18.24)$$

При оценке  $\rho$  нужно помнить, что в (18.12) фазовые множители  $e^{\pm Et/\hbar}$  включены в  $a_{1,2}$  таким образом, что даже в отсутствие  $E$  типичная точка вращается вокруг оси  $\zeta$  с частотой  $\omega_0$ , т. е.  $\dot{\rho} = i\omega_0 \rho$ , если  $E=0$ . Если поле  $E$  есть, то из (18.12) следует, что

$$\dot{\rho} = i\omega_0 \rho + 2(\dot{a}_1 a_2^* + a_1 \dot{a}_2^*) e^{i\omega_0 t} = i(\omega_0 + 2p_1 E/\hbar)\rho + 2ip_{12} E \xi / \hbar. \quad (18.25)$$

Первое слагаемое отражает изменения в скорости вращательного движения по мере изменения  $E$  вследствие взаимодействия  $E$  с  $\pm p_1$ . Если такое вращение взять за основу, то тогда все остальные изменения положения типичной точки можно объединить, используя соотношения (18.24) и (18.25), с тем чтобы получить новые уравнения движения:

$$\dot{\zeta} = -2p_{12} E \eta / \hbar, \quad \dot{\eta} = 2p_{12} E \xi / \hbar, \quad \dot{\xi} = 0. \quad (18.26)$$

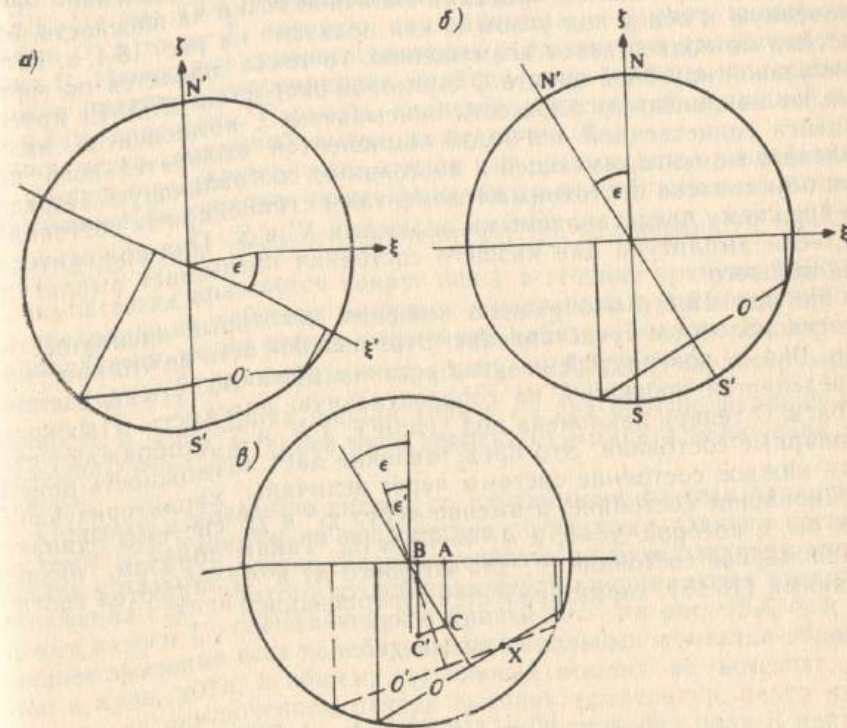


Рис. 18.4. Модификация рис. 18.1, относящаяся к случаю неодинаковых потенциальных ям (а); показано только  $\xi$ - $\zeta$ -сечение;  $\tan \epsilon = \Delta/\Delta_0$ ; рассматриваемый дипольный момент представляет собой  $\xi'$ -компоненту типичной точки; б — альтернативная форма случая а с наклоном  $\epsilon$ , так что  $\zeta$ -компонента представляет собой дипольный момент, но орбита типичной точки для невозмущенной системы теперь наклонена; в — иллюстрация расчета функции ступенчатого отклика

Эти уравнения в простой форме описывают вращение с угловой скоростью  $2p_{12}E/\hbar$  вокруг оси. Постоянные моменты  $\pm p_1$  в стационарных состояниях не играют иной роли в этом движении, кроме зашумления  $\omega_0$  на  $\omega_0 + 2p_1 E/\hbar$  в суммарном вращении рассматриваемой точки вокруг оси  $\rho$  и уменьшении  $p_{12}$  до значения, меньшего  $p_0$ .



Интерпретация претерпевает заметные изменения при попытке получить из рисунка значение  $\langle p \rangle$ . Из (18.10) с учетом того, что фазовые множители включены в  $a_{1,2}$ , имеем

$$\langle p \rangle = p_1(a_1 a_1^* - a_2 a_2^*) + p_{12}(a_1 a_2^* + a_1^* a_2) = p_{12}\xi - p_1\zeta. \quad (18.27)$$

Соотношение (18.20) позволяет выразить  $p_{12}$  как  $p_0 \cos \epsilon$ , а  $p_1$  — как  $p_0 \sin \epsilon$ . Соотношение (18.19) показывает, что  $\epsilon = \Delta/\Delta_0$ . Следовательно,  $\langle p \rangle = p_0(\xi \cos \epsilon - \xi \sin \epsilon)$ . Это значение  $\langle p \rangle$  является  $\xi$ -компонентой проекции типичной точки на плоскость, наклоненную к оси  $y$  под углом  $\epsilon$ , как показано на рис. 18.4, а. Если система не подвергается возмущению, то точка движется по горизонтальной круговой орбите  $O$  с угловой скоростью  $2E/\hbar$ . Ее проекция на наклоненную плоскость описывается  $\xi'$ -компонентой, являющейся единственной значимой компонентой колебательного дипольного момента, имеющей и постоянную составляющую. Последняя обусловлена постоянными моментами стационарных состояний, по-прежнему представляемыми полюсами  $N'$  и  $S'$ . Она положительна, если амплитуда для низшего состояния превышает амплитуду для высшего.

На рис. 18.4, б изображено имеющее некоторые преимущества противоположное представление. Этот рисунок есть не что иное, как рис. 18.4, а, повернутый на угол  $\epsilon$  таким образом, что  $\langle p \rangle$  снова определяется проекцией на горизонтальную плоскость. Плоскость орбиты  $O$  теперь наклонена под углом  $\epsilon$ , а  $N'$  и  $S'$  отображают стационарные состояния. Это представление дает возможность описывать каждое состояние системы через величины, характеризующие стационарное состояние, а именно через  $\chi_1^0$  и  $\chi_2^0$  системы одинаковых ям, в которой  $\Delta = 0$ , а  $A_1^2 = A_2^2 = 1/2$ . Таким образом, низшее стационарное состояние  $S'$ , для которого  $A_1$  и  $A_2$  задаются соотношениями (18.18), характеризуется суперпозицией

$$a_1 \chi_1^0 + a_2 \chi_2^0,$$

где

$$a_1 = \frac{1}{2} [(1 + \Delta/E)^{1/2} + (1 - \Delta/E)^{1/2}],$$

$$a_2 = \frac{1}{2} [(1 + \Delta/E)^{1/2} - (1 - \Delta/E)^{1/2}],$$

так что в соответствии с (18.12)  $\xi = -\Delta_0/E = -\cos \epsilon$ , а  $\xi = \Delta/E = \sin \epsilon$ ; конечно, что координаты  $S'$ .

Попутно можно отметить, что в нестационарном состоянии амплитуды  $A_1$  и  $A_2$  для левой и правой ям легко определяются через положение типичной точки, так как

$$\xi = A_r A_r^* - A_l A_l^* \text{ и } -\zeta + i\eta = 2A_r^* A_l. \quad (18.28)$$

$\xi$ -Координата есть разность заселенностей обеих ям, что подтверждается тем обстоятельством, что данная координата представ-

ляет собой дипольный момент, тогда как азимутальный угол относительно оси  $\xi$ , измеренный из точки, расположенной непосредственно ниже оси, определяет разность фаз между  $A_r$  и  $A_l$ .

Из рис. 18.4, б отклик системы на ступенчатое изменение поля  $E$  сразу становится очевидным. Если  $\Delta$  выражает неодинаковость ям до наложения поля  $E$ , то точка движется по орбите под углом  $\arctg(\Delta/\Delta_0)$ .  $A_l$  и  $A_r$  под действием  $E$  изменяются не мгновенно, однако наклон орбиты теперь меняется до  $\arctg(\Delta'/\Delta_0)$ , где  $\Delta' = \Delta + p_0 E$ . На рис. 18.4, в первоначальная орбита  $O$  показана переходящей в  $O'$  в точке  $X$ , которую она занимала в момент включения поля  $E$ . Изменение среднего значения и амплитуды колебаний  $\langle p \rangle$  можно получить, спроецировав крайние точки орбиты на горизонтальную плоскость. Разность является ступенчатой функцией отклика, четко зависящей от положения точки  $X$ .

Аналогично вычисляется отклик на импульсное воздействие. Включение на короткое время  $\delta t$  сильного поля  $E$  мгновенно повышает  $\Delta'$  до очень высокого значения  $p_0 E$  и  $E$  увеличивается до  $\frac{1}{2} \pi$ . Точка  $X$  тогда вращается вокруг оси  $\xi$  в течение времени  $2p_0 E \delta t / \hbar$  до прекращения действия импульса и первоначальное движение возобновляется, но по слегка смещенной орбите. Импульс  $P_e$ , определяемый как  $\int E dt$ , вызывает вращение  $2p_0 P_e / \hbar$ . Результирующая разность в колебаниях диполя (она в  $P_e$  раз больше функции импульсного отклика) снова явно зависит от момента включения импульса.

Поэтому в ансамбле систем со случайными фазами различные системы откликаются на воздействие по-разному. Однако средний отклик установить легко. Беспорядочность по фазе означает, что до включения ступенчатого воздействия центр инерции точек ансамбля лежит на оси  $\zeta'$ , совпадающей с линией  $N'S'$  на рис. 18.4, б, и что среднее значение всех колебательных дипольных моментов обращается в нуль, хотя, в общем, постоянный момент не исчезнет, поскольку, за исключением случая высоких температур, центр инерции находится ниже центра сферы. При включении поля  $E$  направление оси вращения каждой точки изменяется, то же самое происходит и с центром инерции. Таким образом, если  $C$  на рис. 18.4, в изображает первоначальное положение центра инерции, то средним откликом на воздействие будет орбита  $CC'$ , проекция которой дает отклик  $\bar{p}(t)$ . Очевидно, что значение  $\bar{p}$  достигается в конце цикла колебаний, как это показано на рис. 18.3.

Если  $E$  мало, то угол  $\epsilon' = \epsilon$  составит  $(d/d\Delta) \arctg(\Delta/\Delta_0)/p_0 E$ , т. е.  $\Delta_0 p_0 E / E^2$ . Небольшое вычисление показывает: если  $f$ , длина  $OC$ , отображает относительный избыток заселенности нижнего состояния, то амплитуда колебаний  $1/2AB \times P_0$  будет равна  $(\Delta_0 p_0^2 E f / E^2) \cos \epsilon$  или  $\Delta_0^2 p_0^2 E f / E^3$  в соответствии с первым слагаемым соотношения (18.23), когда  $f$  принимает соответствующее тепловому равновесию значение  $\text{th}[E/(k_B T)]$ . При  $E=1$  функция ступенчатого отклика



$$S(t) = (\Delta_0^2 p_0^2 f / E^3) [1 - \cos(2Et/\hbar)]. \quad (18.29)$$

Производная этого выражения  $dS/dt$  есть функция импульсного отклика

$$h(t) = [2\Delta_0^2 p_0^2 f / (\hbar E^2)] \sin(2Et/\hbar). \quad (18.30)$$

Это в точности совпадает с тем, что получается, как отмечалось раньше, если точку  $C$  повернуть на  $2p_0/\hbar$  вокруг оси  $\xi$ . До тех пор пока смещения  $C$  малы, и линейность сохраняется, и эффекты воздействия гребенки импульсов аддитивны.

Приведенные выражения не учитывают диссипативных процессов и поэтому не объясняют присутствия второго слагаемого в (18.23). Это объяснение появляется при последующем развитии теории.

#### 18.4. РАДИАЦИОННОЕ ЗАТУХАНИЕ В ДВУХУРОВНЕВОЙ СИСТЕМЕ

Начнем с того, что рассмотрим модель, для которой желаемые результаты можно получить без большого количества дополнительных вычислений, лишь исходя из соображений, изложенных в гл. 16 (см. § 16.1). Модель состоит из двухуровневой системы для частицы массы  $m_1$ , осуществляющей туннельный переход между двумя одинаковыми потенциальными ямами, и гармонического осциллятора с массой  $m_0$ , совершающего колебания с частотой  $\omega_0$ , близкой к  $2\Delta_0/\hbar$ . Такая пара (двухуровневая система и осциллятор) обладает слабой связью, реализующейся через воздействие на поляризацию системы электрического поля осциллятора, пропорционального смещению. В противоположность этому со стороны системы  $x$  на осциллятор действует постоянная сила, знак которой, однако, зависит от того, в какой из потенциальных ям находится частица. Параметр связи содержится в гамильтониане для комбинированной системы:

$$H'(x, y) = T_0(\dot{x}) + V_0(x) + T_1(\dot{y}) + V_1(y) + Cx \operatorname{sgn}(y). \quad (18.31)$$

Здесь  $T_1$  и  $V_1$  относятся к потенциальной яме, а  $T_0$  и  $V_0$  — к осциллятору;  $\operatorname{sgn}(y) = \pm 1$  в зависимости от знака  $y$ . Стационарное уравнение Шредингера для модели принимает вид

$$[\hbar/(2m_1)] \partial^2 \varphi / \partial y^2 + (\hbar^2/2m_0) \partial^2 \varphi / \partial x^2 + [W - V_1 - V_0 - Cx \operatorname{sgn}(y)] \varphi = 0. \quad (18.32)$$

Если  $C=0$ , то решения уравнения для энергии  $W_0$  представляют собой произведение волновых функций  $\chi(y)\psi(x)$ , компоненты которых либо четны  $[\chi_1(y) \cdot \psi_{2l}(x)]$ , либо нечетны  $[\chi_2(y) \cdot \psi_{2l+1}(x)]$ . Коэффициент связи является нечетным как для  $x$ , так и для  $y$ , а матричный элемент, связывающий два произведения волновых функций, обращается в нуль, если только одно из произведений содержит  $\chi_1$ , а другое —  $\chi_2$ .

Более того, поскольку функции  $\psi(x)$  относятся к осциллятору, при появлении пары в любом ненулевом матричном элементе они должны быть «соседними»:  $\psi_l$  и  $\psi_{l+1}$ . Тогда при слабой связи каждое произведение  $\chi_1\psi_n$  допускает дополнение наиболее сильным, если дополнение  $\chi_2\psi_{n+1}$ . Смешивание становится близки друг к другу. вовлеченные энергетические уровни  $\chi_1\psi_{n+1}$  наиболее сильно модифицирует дополнение  $\chi_2\psi_n$ , а  $\chi_2\psi_n$  — дополнение  $\chi_1\psi_{n+1}$ . Поэтому действительные решения уравнения (18.32) будем искать в виде

$$\Phi_n = \alpha_n \chi_1 \psi_{n+1} + \beta_n \chi_2 \psi_n; \quad \alpha_n^2 + \beta_n^2 = 1. \quad (18.33)$$

Подставив предполагаемое решение в (18.32), получим

$$\begin{aligned} \alpha_n [W + \Delta_0 - E_{n+1} - Cx \operatorname{sgn}(y)] \chi_1 \psi_{n+1} + \\ + \beta_n [W - \Delta_0 - E_n - Cx \operatorname{sgn}(y)] \chi_2 \psi_n = 0. \end{aligned} \quad (18.34)$$

Здесь  $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega_0$ . Малые величины, опущенные при аппроксимации в (18.33), вносят пренебрежимо малый вклад, когда соотношение (18.34) умножается либо на  $\chi_1\psi_{n+1}$ , либо на  $\chi_2\psi_n$  и интегрируется по обоим переменным для получения приближения первого порядка:

$$\alpha_n (\Omega_n + \omega_e) = \beta_n CM_{n,n+1}^{(1)}/\hbar \quad \text{и} \quad \beta_n (\Omega_n - \omega_e) = \alpha_n CM_{n,n+1}^{(1)}/\hbar, \quad (18.35)$$

где  $\Omega_n = W/\hbar - (n+1)\omega_0$ ,  $\omega_e = \Delta_0/\hbar - 1/2\omega_0$ , а  $M_{n,n+1}^{(1)}$  — тот же самый матричный элемент, что и в соотношении (13.26), за исключением того, что в лабораторных единицах он принимает значение  $[\hbar(n+1)/(2m_0\omega_e)]^{1/2}$ .

Структуру энергетических уровней получаем, исключив  $\alpha_n$  и  $\beta_n$  из соотношения (18.35). Она имеет ту же гиперболическую форму, что и структура частот нормальных мод, выраженная соотношением (12.11) (см. § 12.1). Снова получается близкая аналогия со связанными контурами из гл. 12:

$$\Omega_n^2 = \omega_e^2 + \gamma^2(n+1), \quad \text{где} \quad \gamma = C/(2\hbar\omega_0 m_0)^{1/2}. \quad (18.36)$$

Когда системы не связаны, несовпадение значений  $\omega_0$  и  $2\Delta_0/\hbar$  приводит к тому, что уровни появляются парами, как показано на рис. 18.5. Связывание увеличивает расщепление, а присутствие величины  $n+1$  в (18.36) усиливает эффект для более высоких уровней. Стоящий особняком самый нижний уровень остается невозмущенным.

Следует помнить, что данный анализ распространяется на воздействие  $C$  на волновую функцию в первом порядке (по отношению к энергии во втором порядке). Поэтому к тому времени, когда расщепление уровней так велико, как показано в правой части рисунка, эффекты более высоких порядков несомненно начнут сказываться и изменят детали. Но мы ограничимся рассмотрением только эффектов первого порядка.



Из (18.35) имеем

$$\alpha_n^2/\beta_n^2 = (\Omega_n - \omega_e)/(\Omega_n + \omega_e). \quad (18.37)$$

На рисунке  $\omega_e$  положительно и для состояния  $P$  ( $\Omega_n - \omega_e$ ) представлено как  $PR$ , а  $(\Omega + \omega_e)$  — как  $PS$ . Следовательно,  $\alpha_n/\beta_n = \pm [PR/(PS)]^{1/2}$ . Соотношения (18.35) показывают, что  $\alpha_n$  и  $\beta_n$  имеют одинаковый знак. Для состояния  $Q$  отношение  $|\alpha_n/\beta_n|$  меняется и знаки  $\alpha_n$  и  $\beta_n$  становятся противоположными.

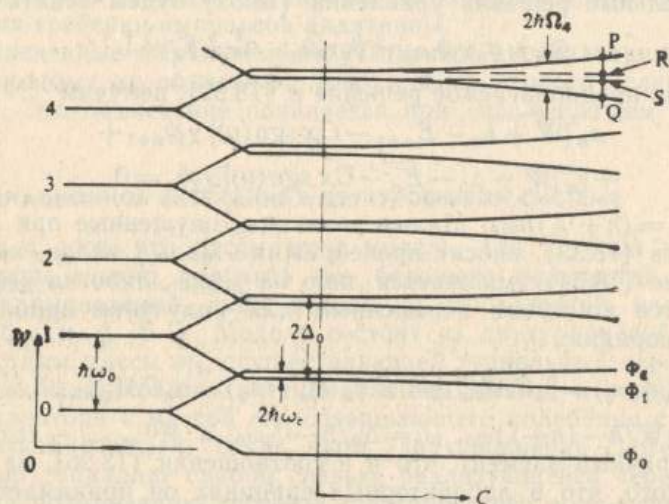


Рис. 18.5. Энергетические уровни для системы с двумя потенциальными ямами, связанной с гармоническим вибратором. Для левой части рисунка связь отсутствует и уровни соответствуют значениям энергии  $(n+1/2)\hbar\omega_0 \pm \Delta_0$ . Ширина  $\Delta_0$  выбрана немного большей, чем  $\omega_0$ . С увеличением константы связи  $C$  расщепление возрастает, и тем сильнее, чем больше возбужден вибратор

Это поведение в точности совпадает с тем, что отмечалось для аналогичных случаев ранее. Так как  $\alpha_n^2 + \beta_n^2 = 1$ , то для состояния  $P$ , как это вытекает из (18.37), справедливы условия

$$\alpha_n^2 = 1/2(1 - \omega_e/\Omega_n), \quad \beta_n^2 = 1/2(1 + \omega_e/\Omega_n). \quad (18.38)$$

Используем этот вывод, чтобы проследить поведение системы двух потенциальных ям, очень слабо связанной с невозбужденным осциллятором. Эта система служит моделью для излучения энергии в одну моду резонатора. Как и в гл. 16, положим резонатор столь большим, что в любой момент после возникновения связи вероятность возбуждения какой-либо моды чрезвычайно мала. Это накладывает упрощающее ограничение на форму волновой функции, которая будет соответствовать только трем самым нижним состояниям комбинированной системы:  $\phi_0$ ,  $\phi_1$  и  $\phi_2$ , как показано на рис. 18.5. Если в момент наложения связи для удоб-

ва положить  $t=0$ , то пространственную часть  $\Psi$  можно записать так:

$$\left. \begin{aligned} \Psi(0) &= \lambda_0 \Phi_0 + \lambda_1 \Phi_1 + \lambda_2 \Phi_2, \\ \text{где } \Phi_0 &= \chi_1 \psi_0, \quad \Phi_1 = -\beta_0 \chi_1 \psi_1 + \alpha_0 \chi_2 \psi_0, \\ \Phi_2 &= \alpha_0 \chi_1 \psi_1 + \beta_0 \chi_2 \psi_0 \text{ и } \lambda_0 \lambda_0^* + \lambda_1 \lambda_1^* + \lambda_2 \lambda_2^* = 1. \end{aligned} \right\} \quad (18.39)$$

Следовательно,

$$\Psi(0) = \lambda_0 \chi_1 \psi_0 + (\lambda_1 \alpha_0 + \lambda_2 \beta_0) \chi_2 \psi_0 + (\lambda_2 \alpha_0 - \lambda_1 \beta_0) \chi_1 \psi_1. \quad (18.40)$$

Поскольку осциллятор считается невозбужденным, коэффициент при  $\varphi_1$  обращается в нуль, т. е.

$$\lambda_2 \alpha_0 = \lambda_1 \beta_0. \quad (18.41)$$

Абсолютные значения фаз не играют роли, поэтому будем считать  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  действительными.  $\lambda_0$  может быть комплексным.

Присутствие трех слагаемых в  $\Phi(0)$  показывает, что в дальнейшем  $\Psi$  начинает быстро осциллировать на частоте  $\omega_0$  с амплитудой, промодулированной низкой частотой  $\Omega_0$ . Эти биения вызваны наличием  $\Phi_1$  и  $\Phi_2$  в (18.41). Соответственно энергия двухуровневой системы и амплитуда колебательного дипольного момента будут флуктуировать с низкой частотой  $\Omega_0$ . В момент времени  $t$

$$\Psi(t) = \lambda_0 e^{i\omega_e t} \Phi_0 + \lambda_1 e^{-i(\omega_0 - \Omega_0)t} \Phi_1 + \varphi_2 e^{-i(\omega_0 + \Omega_0)t} \Phi_2,$$

что можно записать аналогично (18.40):

$$\Psi(t) = \lambda_0 e^{i\omega_0 t} \chi_1 \psi_0 + (\lambda_1 \alpha_0 e^{i\omega_0 t} + \lambda_2 \beta_0 e^{-i\omega_0 t}) e^{-i\omega_0 t} \chi_2 \psi_0 +$$

$$+ (\lambda_2 \alpha_0 e^{-i\omega_0 t} - \lambda_1 \beta_0 e^{i\omega_0 t}) e^{i\omega_0 t} \chi_1 \psi_1. \quad (18.42)$$

Вероятность нахождения системы двух потенциальных ям в своем возбужденном состоянии определяется вторым слагаемым — единственным, содержащим  $\chi_2$ . Используя (18.36), (18.38) и (18.41), получаем

$$P_2(t) = |\lambda_1 \alpha_0 e^{i\Omega_0 t} + \lambda_2 \beta_0 e^{-i\Omega_0 t}|^2 = (\lambda_1 \alpha_0 + \lambda_2 \beta_0)^2 - 4\lambda_1 \lambda_2 \alpha_0 \beta_0 \sin^2 \Omega_0 t = P_2(0) [1 - (\gamma^2 / \Omega_0^2) \sin^2 \Omega_0 t]. \quad (18.43)$$

Соотношение (18.43), описывающее обмен энергией, имеет точно такой же вид, что и соотношение (16.14), определяющее радиационный обмен между осциллятором и модой резонатора при столь слабой связи, что  $\Omega_0$  можно положить равным  $\omega_e$ . Здесь, как и в предыдущем примере, не делалось специальных предположений об исходном состоянии. Его параметры исчезли из (18.43). Отсюда следует, что связь со всеми модами в полном резонаторе заставляет  $P_2$  и энергию возбуждения системы убывать экспоненциально. Так как (18.43) показывает, что исходная энер-



гия передается одной-единственной моде, то ее поведение будет таким же, как и описываемое соотношением (16.16), т. е.

$$E(0) - E(t) = E(0) \gamma^2 t^2.$$

Тогда можно тут же определить  $\tau_e$  — постоянную времени для потерь энергии в резонаторе. Приравняв  $\gamma^2$  к  $1/(2\pi g \tau_e)$ , получаем

$$\tau_e = 1/(2\pi g \gamma^2). \quad (18.44)$$

Здесь  $g = 4\Delta_0^2 V / (\pi^2 \hbar^2 c^3)$  — плотность состояний для резонатора с объемом  $V$  на частоте  $2\Delta_0/\hbar$ .

Чтобы определить величину  $\gamma$ , вернемся в гамильтониану (18.31). Рассмотрим типичную моду с частотой  $2\Delta_0/\hbar$  в некоторый момент времени, когда поле  $E$  достигает максимума, и запишем  $\bar{E}^2$  для среднего квадрата поля, усредненного по всему резонатору. Тогда энергию моды  $1/2 \epsilon_0 V \bar{E}^2$  следует приравнять к  $1/2 m_0 \dot{x}^2 \times (2\Delta_0/\hbar)^2 x^2$  — потенциальной энергии эквивалентного осциллятора. Квадрат энергии связи в (18.31) следует положить равным  $Sx^2$ . Множитель  $1/3$  возникает, как и в гл. 16 (см. § 16.3), вследствие различия поляризации на разных модах. Следовательно,

$$C^2 = 4m_0 \Delta_0^2 p_0^2 / (3\hbar \epsilon_0 V), \quad (18.45)$$

$$\gamma^2 = \Delta_0 p_0^2 / (3\hbar^2 \epsilon_0 V). \quad (18.46)$$

Этот результат вытекает из (18.36), если  $\hbar\omega_0$  положить равным  $2\Delta_0$ . Затем из (18.44) получаем

$$\tau_e = 3\pi \hbar^4 c / (8\mu_0 \Delta_0^3 p_0^2). \quad (18.47)$$

Диполь Герца с массой  $m_{12}$ , осциллирующий с частотой  $2\Delta_0/\hbar$ , имеет постоянную времени для потерь энергии, равную  $3\pi m_{12} \hbar^2 c \times (2\mu_0 \Delta_0^2 e^2)^{-1}$  (см. § 16.3). Постоянные времени совпадают, если  $f_{12}$ , т. е.  $m/m_{12}$ , равна  $4m\Delta_0 p_0^2 / (\hbar^2 e^2)$ , что представляет собой уже непосредственно вычисленную величину (см. § 18.3). Система двух потенциальных ям, подобно гармоническому осциллятору, реагирует не только на слабые стимуляции, но, так же как и эквивалентный осциллятор, спонтанно излучает. Разумеется, если бы мы не пришли к этому заключению, то оказались бы в затруднительном положении потому, что доводы Эйнштейна, предусматривающие детальный баланс между полем излучения и материальным осциллятором (к которому мы вскоре возвратимся), требуют, как это выражено в (16.29), однозначной связи между стимулированными и спонтанными процессами, если считать, что больцмановское распределение всегда справедливо.

Если движение классического осциллятора экспоненциально затухает, то постоянная времени для убывания энергии составляет половину постоянной времени для затухания амплитуды, т. е. дипольного момента. То же самое имеет место для системы потенциальных ям.

Чтобы показать это, возвратимся к соотношению (18.42) и оценим  $\langle y(t) \rangle$ , т. е.  $\iint \Psi^*(t) y \Psi(t) dy dx$ . Из девяти величин в произведении  $\Psi^* \Psi$  вследствие симметрии остаются только две, а именно те, которые имеют вид  $\chi_1 \chi_2 \psi_0^* \psi_0$ . С помощью (18.41) получаем

$$\langle p \rangle / p_0 = 2 \operatorname{Re} [(\lambda_0^* \lambda_1 / \alpha_0) e^{-i(\omega_0 + \omega_e)t} (\alpha_0^2 e^{i\omega_0 t} + \beta_0^2 e^{-i\omega_0 t})]. \quad (18.48)$$

Первая часть, содержащая множитель  $e^{-i(\omega_0 + \omega_e)t}$ , представляет собой быстрое колебание, амплитуда которого медленно меняется в соответствии со слагаемыми в скобках. Их абсолютные значения и изменения со временем несут информацию, необходимую для определения затухания колебаний диполя. Если  $\operatorname{Amp}(p)$  записать для  $|\alpha_0^2 e^{i\omega_0 t} + \beta_0^2 e^{-i\omega_0 t}|$ , то

$$[\operatorname{Amp}(p)]^2 = 1 - 4\alpha_0^2 \beta_0^2 \sin^2 \omega_0 t = 1 - (\gamma^2 / \Omega_0^2) \sin^2 \omega_0 t.$$

Это выражение имеет такой же вид, что и (18.43). Отсюда делаем вывод, что квадрат колебательного дипольного момента убывает экспоненциально с постоянной времени  $\tau_e$ , а сам момент уменьшается с постоянной времени  $\tau_p$ , равной  $2\tau_e$ , подобно классическому диполю.

Затухание, вызываемое спонтанным излучением, явно отражено в геометрическом представлении системы двух потенциальных ям. В отсутствие внешнего возмущения некоторая выбранная нами точка вращается с угловой частотой  $2E/\hbar$  вокруг наклонной оси, показанной на рис. 18.4, б\*. Однако теперь ее отклонение над нижним состоянием  $S'$ , измеренное вдоль  $S'N'$ , экспоненциально убывает с постоянной времени  $\tau_e$ , поскольку эта постоянная характеризует энергию возбуждения, в то время как радиус круговой орбиты, который определяет колебания диполя, уменьшается со скоростью вдвое меньшей. Фундаментальным положением квантовой механики является то, что волновую функцию двух (или более) несвязанных систем можно записать в виде простого произведения. Поэтому в отсутствие связи точка может покинуть сферу, при наличии же связи изменения волновой функции таковы, что это невозможно, даже если связь свести к нулю.

Восстановить волновую функцию в виде произведения можно только оговорив в отдельности состояние каждой компоненты. В этом случае типичная точка, однажды закрепленная на сфере, должна оставаться на ней все время, в течение которого система действительно изолирована от других квантовых систем, поскольку энергия и амплитуда диполя связаны однозначно. Связь с резонатором разрушает уникальность этой закономерности.

\* Здесь обобщаются выводы, полученные для системы двух одинаковых потенциальных ям, на случай неодинаковых ям.



### 18.5. УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ В ДВОЙНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ С ЗАТУХАНИЕМ

В тех случаях, когда система с двойной потенциальной ямой подвергается воздействию внешних слабых сил или обладает затуханием, вызванным излучением, эти процессы на любом коротком промежутке времени могут рассматриваться как независимые. Оговорка о слабости сил необходима потому, что  $\tau_e$  и  $\tau_p$  меняются с изменением  $\Delta$ . Для нахождения изменений заметим, что диполь Герца с массой  $m_{12}$  в соответствии с (16.11) характеризуется временем затухания, пропорциональным  $m_{12}/\omega^2_{12}$ . Из (17.2) и (18.2) следует, что в данном случае  $f_{12}$  равна  $2m\omega_{12}p^2_{12}/(\hbar e^2)$  и изменяется в соответствии с (18.19) как  $1/E$ , так как  $\omega_{12} \sim E$ . Следовательно,  $\tau_e$  и  $\tau_p$  (пропорциональные  $1/(\omega^2_{12}f_{12})$ ), также изменяются как  $1/E$ .

По отношению к системе с одинаковыми потенциальными ямами времени затухания должны уменьшиться в  $\Delta_0/E$ , т. е. в  $\Delta_0(\Delta_0^2 + p^2E^2)^{1/2}$  раз. Более того, когда  $p_0E$  сравнимо с  $\Delta_0$ , проиллюстрированное рис. 18,4 б, в поведение системы характеризуется наклоненной осью. Если представить себе, что воздействие представляет собой последовательность коротких импульсов, то быстрое затухание происходит во время действия этих импульсов.

Однако легко показать, что, коль скоро среднее значение  $p_0E$  много меньше  $\Delta_0$ , всеми этими эффектами можно пренебречь и предполагаемое затухание происходит между импульсами и протекает с нормальной скоростью. Из этого предположения мы и будем исходить при выводе функции импульсного отклика для двойной потенциальной ямы с радиационным затуханием. В любой момент эту функцию можно выразить суммой решений для стационарных состояний несвязанной системы. Эти решения представляют собой произведение волновых функций типа  $\chi_1\psi_n(x_i)$  или  $\chi_2\psi_n(x_i)$ . Здесь  $\psi_n(x_i)$  — сокращенное обозначение произведения волновых функций в предположении, что на каждую моду резонатора приходится одна колебательная функция.

Непосредственно перед импульсом

$$\Psi = \sum_n [\lambda_n \chi_1 \psi_n(x_i) + \mu_n \chi_2 \psi_n(x_i)]. \quad (18.49)$$

Слабый импульс  $P = \int E dt$ , действующий только на двойную потенциальную яму, в соответствии с (13.31) добавляет к  $\Psi$  приращение  $ieyP\Psi/\hbar$ . Пусть  $\chi_1$  имеет амплитуду  $+1/\sqrt{2}$  в каждой из ям, когда они одинаковы (это единственный случай, который будет рассмотрен), а  $\chi_2$  — амплитуду  $\pm 1/\sqrt{2}$ .

Импульс добавляет величину  $ip_0P/(V^2\hbar)$  к амплитуде  $\chi_1$  в правой яме и уменьшает на столько же амплитуду  $\chi_2$  в левой яме. Это означает, что  $\chi_1$  переходит в  $\chi_2 + (ip_0P/\hbar)\chi_2$ , а  $\chi_2$  — в  $\chi_2 - (ip_0P/\hbar)\chi_1$ . Каждое значение  $\lambda_n$  в соотношении (18.49) оказыва-

ется преобразованным в  $\lambda_n + i\kappa\mu_n$ , а каждое значение  $\mu_n$  — в  $\mu_n + i\kappa\lambda_n$ , где  $\kappa = p_0P/\hbar$ .

Первоначальная вероятность  $P_1$  нахождения системы двух потенциальных ям в своем основном состоянии, как бы ни вел себя осциллятор, составляет  $\sum_n \lambda_n \lambda_n^*$ , а вероятность его возбуждения  $P_2$  равна  $\sum_n \mu_n \mu_n^*$ . Изменения в значениях  $\lambda_n$  и  $\mu_n$ , вызванные действием импульса, определяются изменениями в первом порядке вероятностей  $P_1$  и  $P_2$ :

$$\delta P_1 = -\delta P_2 = i\kappa \sum_n (\mu_n \lambda_n^* + \lambda_n^* \mu_n). \quad (18.50)$$

Взяв  $\langle \Psi^* | y | \Psi \rangle$ , вычислим дипольный момент:

$$\langle p \rangle / p_0 = \sum_n (\mu_n \lambda_n^* + \lambda_n^* \mu_n). \quad (18.51)$$

Эти результаты немедленно приводят к соответствующей модификации геометрического представления (18.12):

$$\zeta = \sum_n (\mu_n \mu_n^* - \lambda_n \lambda_n^*) = \sum_n (1 - 2\lambda_n \lambda_n^*), \quad (18.52)$$

$$\rho = \xi + i\eta = 2 \sum_n \lambda_n \mu_n^*.$$

Легко проверить, что никакая определенная таким образом точка не может находиться вне единичной сферы и что при нахождении на сфере  $\mu_n = c\lambda_n$ , где  $c$  — комплексная постоянная; соотношение (18.49) принимает вид, свойственный несвязанным системам и резонатору:  $\Psi = (\chi_1 + c\chi_2) \sum_n \lambda_n \psi_n$ . Иначе говоря, точка лежит внутри сферы, как и ожидалось из анализа связанных систем. Наложение условий (18.12) равносильно требованию, чтобы выражение  $1/2(\zeta + 1)$  описывало вероятность нахождения системы двух потенциальных ям в возбужденном состоянии, а  $\xi$  — дипольный момент. Не подвергаясь возмущению, выбранная нами точка движется по орбите вокруг  $\zeta$ -оси с угловой скоростью  $2\Delta_0/\hbar$  потому, что каждый сомножитель в  $\rho$  имеет на этой скорости возрастающий фазовый угол. Поэтому можно быть уверенным, что процесс диссипации, как уже было установлено, будет происходить с постоянной времени  $\tau_e$  для  $1 + 2\zeta$  и  $2\tau_e$  для  $\rho$ . Можно записать и отклик на импульсное воздействие:

$$\delta p = 2 \sum_n (\lambda_n \delta \mu_n^* + \mu_n^* \delta \lambda_n) = 2i\kappa \sum_n (\mu_n \mu_n^* - \lambda_n \lambda_n^*) = 2i\kappa \zeta,$$

$$\delta \xi = 0, \quad \delta \eta = 2\kappa \zeta \text{ и, аналогично, } \delta \zeta = -2\kappa \eta.$$

Эти соотношения описывают поворот на угол  $2\kappa$ , т. е. на  $2p_0P/\hbar$ , вокруг оси  $\xi$ , что в точности совпадает с условием (18.30) для изолированной двойной потенциальной ямы.



Теперь можно записать уравнения движения под действием переменного поля  $E(t)$  в декартовых координатах:

$$\left. \begin{aligned} \dot{\xi} &= 2\Delta_0\tau/\hbar - \xi/\tau_p, \\ \dot{\eta} &= -2\Delta_0\xi/\hbar - \eta/\tau_p + 2p_0E\tau/\hbar, \\ \dot{\zeta} &= (\zeta_0 - \zeta)/\tau_e - 2p_0E\eta/\hbar. \end{aligned} \right\} \quad (18.53)$$

Структура этих уравнений весьма чувствительна к тому, учитываем мы или нет вклады в уравнения, вносимые вращением вокруг  $\xi$  на частоте  $2\Delta_0/\hbar$ , вращением, вызываемым полем  $E$ , и потерями с двумя различными постоянными времени. Замена  $-(1 - \xi)/\tau_e$  в третьем уравнении на  $(\zeta_0 - \xi)/\tau_e$  удачна, поскольку позволяет отразить экспоненциальное убывание координаты  $\xi$  в направлении точки, которая не является низшим состоянием в чистом виде. Это, как вскоре будет показано, учитывает как стимулированные, так и спонтанные процессы при отличных от нуля температурах.

Уравнения движения, полученные для случая одинаковых потенциальных ям, фактически совпадают с уравнениями Блоха (8.18) и (8.19) для ядерного спинового резонанса (см. § 8.5). Обе постоянные времени в (18.53) являются составными частями  $T_1$  (время продольной релаксации, совпадает с  $\tau_e$ ) и  $T_2$  (время поперечной релаксации, совпадает с  $\tau_p$ ).

В общем случае кроме излучения существуют и другие диссипативные механизмы и  $\tau_p$  не обязательно равно  $2\tau_e$ . В действительности, как будет показано в дальнейшем, процессы, происходящие при сохранении энергии, но нарушающие фазовые соотношения, могут понизить  $\tau_p$ , сохраняя неизменным  $\tau_e$ .  $\tau_p$  не может превысить значения  $2\tau_e$ . Если потенциальные ямы неодинаковы или если поле  $E$  велико (или если эти два условия выполняются одновременно), нужно ввести другие оси, скорости и времена затухания. На рис. 18.4, б наклон  $\epsilon$  определен мгновенным значением  $E$ , на который влияют как  $\Delta$ , так и  $p_0E$ . Наклонная ось является также направлением релаксации энергии с постоянной времени  $\tau_e$ , замененной на  $\Delta_0\tau_e/E$ . Ясно, что если поле  $E$  одновременно и велико, и меняется, то уравнения становятся, к сожалению, нелинейными и мы не станем даже записывать их.

Когда  $\tau_e$  и  $\tau_p$  велики, а  $E$  колеблется на частоте, близкой к  $2\Delta_0/\hbar$ , то даже слабое поле может вызвать значительные возмущения. Поведение, иллюстрируемое рис. 18.1, является характерным для системы без затухания и в значительной мере переходным, когда имеется диссипация.

Поищем стационарное решение уравнений (18.53) для состояния, когда перехода нет, а изменения  $\xi$ ,  $\eta$  и  $\zeta$  происходят синхронно с основной частотой  $\omega$ . Если

$$E = E_0 \cos \omega t = \frac{1}{2} E_0 (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}),$$

то первые два уравнения показывают, что в самом грубом приближении  $\xi$  и  $\eta$  пропорциональны  $E$ . Поэтому третье уравнение содержит  $\epsilon$  только во второй степени. Далее, предположим, что  $\zeta$  принимает постоянное значение  $\bar{\zeta}$ , которое не равно  $\zeta_0$ , так как содержит  $E\eta$  постоянную компоненту. При постоянном  $\zeta$  первые два уравнения удобно выразить через величины  $\rho = (\xi + i\eta)$ :

$$\tau_p \dot{\rho} + (1 + 2i\Delta_0\tau_p/\hbar)\rho = (ip_0\tau_p\bar{\zeta}E/\hbar)(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}). \quad (18.54)$$

Вблизи резонанса, при  $2\Delta_0\tau_p \gg 1$ , в решении доминирует второй экспоненциальный член, а членом с положительным показателем степени можно пренебречь. Тогда  $\rho = \rho_0 e^{-i\omega t}$ , где

$$\begin{aligned} \rho_0 &= (ip_0E_0\tau_p\bar{\zeta}/\hbar)/[1 + i(\omega_{12} - \omega)\tau_p]; \\ \omega_{12} &= 2\Delta_0/\hbar. \end{aligned} \quad (18.55)$$

Так как мнимая часть  $\rho_0$  является амплитудой  $\eta$ , то

$$\eta = (p_0E_0\tau_p\bar{\zeta}/\hbar) [\cos \omega t - (\omega_{12} - \omega)\tau_p \sin \omega t] / [1 + (\omega_{12} - \omega)^2 \tau_p^2],$$

а среднее значение  $E\eta$  составляет

$$\frac{1}{2} p_0 E_0^2 \tau_p \bar{\zeta} / \hbar [1 + (\omega_{12} - \omega)^2 \tau_p^2].$$

Подставив эти выражения в третье уравнение системы (18.53) и положив  $\dot{\zeta}$  равным нулю, получим в качестве решения среднее значение  $\bar{\zeta}$ :

$$\bar{\zeta} = \zeta_0 \left[ 1 + \frac{p_0^2 E_0^2 \tau_e \tau_p / \hbar^2}{1 + (\omega_{12} - \omega)^2 \tau_p^2} \right]^{-1}. \quad (18.56)$$

Если  $\zeta_0$  соответствует положению равновесия невозмущенной системы, поддерживаемой в контакте с излучением черного тела при температуре  $T$ , то  $\zeta_0 = -\hbar[\Delta/(k_B T)]$  и уменьшение в  $|\zeta_0|$ , выраженное соотношением (18.56), можно истолковать как повышение эффективной температуры  $T_{\text{эф}}$ . Энергия, поступающая в систему за счет действия  $E$  на осциллирующие диполи, может рассеиваться только со скоростью, в  $(\bar{\zeta} - \zeta_0)/\tau_e$  раз отличающейся от скорости поступления.

Причина, по которой  $\tau_p$  появляется в (18.56) наряду с  $\tau_e$ , состоит в том, что это облегчает определение параметров осциллирующего диполя, а следовательно, через них и вводимой энергии.

Если  $\tau_e$  и  $\tau_p$  достаточно велики, а  $\omega_{12} - \omega$  достаточно мало, то  $\bar{\zeta}$  можно уменьшить практически до нуля ( $T_{\text{эф}} \rightarrow \infty$ ), пока  $E$  остается достаточно малым для применения линейной аппроксимации.

Для отклика диполя получаем из (18.55)

$$\begin{aligned} |\rho_0| &= (p_0E_0\tau_p\zeta_0/\hbar) [1 + (\omega_{12} - \omega)^2 \tau_p^2]^{1/2} / [1 + \\ &+ (\omega_{12} - \omega)^2 \tau_p^2 + p_0^2 E_0^2 \tau_e \tau_p / \hbar^2]. \end{aligned} \quad (18.57)$$



Пока амплитуда поля  $E_0$  не столь велика, чтобы вызвать значительное «нагревание»,  $|\rho_0| \sim E_0$ . Однако по мере увеличения  $E_0$   $|\rho_0|$  падает до нуля пропорционально  $1/E_0$ . Естественно, что насыщение  $|\rho_0|$  легче всего достигается при резонансе, когда  $\omega = \omega_{12}$ .

В этом случае в соответствии с (18.56)  $\xi$  уменьшается в  $1 + 2\rho_0^2 E_0^2 \tau_e^2 / \hbar^2$  раз, если  $\tau_p = 2\tau_e$ . Подставив вместо  $\rho_0^2$  выражение  $\hbar e^2 f / (2\omega_{12} m)$ , вместо  $\tau_e = 6\pi m c / (f \mu_0 \omega_{12}^2 e^2)$  и вместо  $E_0^2 = 2\Phi / (\epsilon_0 c)$ , где  $\Phi$  — интенсивность излучения, получим для перехода на длине волны  $\lambda$

$$2\rho_0^2 E_0^2 \tau_e^2 / \hbar^2 = 9m\lambda^5 \Phi / (4\pi^3 \mu_0 c^2 e^2 \hbar) \approx 2 \cdot 10^{29} \lambda^5 \Phi / f.$$

Насыщение типичного оптического перехода с  $f \sim 1$  и  $\lambda \sim 5 \cdot 10^{-7}$  м происходит при интенсивности излучения  $\sim 160$  Вт·м $^{-2}$ , которое уменьшает  $\xi_0$  вдвое, что ведет к насыщению перехода.

Такую интенсивность монохроматического излучения дает газовый лазер, работающий в непрерывном режиме. На более низких частотах, например в микроволновом спектральном диапазоне, для получения некоторой степени насыщения  $\Phi$  должна была бы зависеть от  $\lambda^{-5}$ . Это означает, что даже самые слабые источники должны насыщать переходы. Следует, однако, помнить, что проведенный расчет учитывает в диссипации лишь процессы излучения, а в области длинных волн они не эффективны, что и обуславливает полученный результат. Практически в механизме потерь доминируют соударения между молекулами, но даже в этом случае нетрудно насытить переход очень небольшой интенсивностью излучения. То же самое относится к ядерному магнитному резонансу, для которого обычно нужны очень низкие уровни интенсивности.

#### 18.6. СТИМУЛИРОВАННЫЕ И СПОНТАННЫЕ ПЕРЕХОДЫ

Введение в соотношения (18.13) величины  $\xi_0$  вместо  $-1$ , как этого требует теория спонтанных переходов, является весьма очевидным обобщением. Однако оно требует обсуждения. Представим себе, что двухуровневую систему поместили в поле равновесного при температуре  $T$  излучения резонатора. Следуя нашей обычной практике, рассмотрим взаимодействие только с одним осциллятором резонатора. Только теперь он первоначально находится не в своем основном состоянии, а в смешанном возбужденном состоянии. Тогда в момент установления связи результирующая волновая функция имеет вид

$$\Phi(0) = (a_1 \chi_1 + a_2 \chi_2) \sum_n b_n \psi_n. \quad (18.58)$$

Если нас интересует изменение средней энергии ансамбля схожих систем, то нужно предположить, что функции  $\psi_n$  осцилляторов резонатора имеют не только беспорядочные фазы. Тогда един-

ственными представляющими для нас интерес будут те результаты, которые получаются в результате усреднения величин  $a_1$  и  $a_2$  по всем фазам. Это позволит проследить в отдельности за развитием каждой величины в (18.18) (что допустимо вследствие линейности уравнения Шредингера) и пренебречь корреляцией фаз при подытоживании результатов.

Итак, начнем с типичной величины  $a_1 \chi_1 b_n \psi_n$  и выразим ее суммой стационарных состояний (18.33):

$$\chi_1 \psi_n = \alpha_{n-1} \Phi' + \beta_{n-1} \Phi'', \quad (18.59)$$

где

$$\Phi' = \alpha_{n-1} \chi_1 \psi_n + \beta_{n-1} \chi_2 \psi_{n-1}$$

и

$$\Phi'' = \beta_{n-1} \chi_1 \psi_n - \alpha_{n-1} \chi_2 \psi_{n-1}.$$

Последующее поведение волновой функции связано с биениями на частоте  $2\Omega_{n-1}$  двух величин в (18.59). Через полпериода в сительные фазы становятся обратными и  $\chi_1 \psi_n$  обращается в  $(\alpha_{n-1}^2 - \beta_{n-1}^2) \chi_1 \psi_n + 2\alpha_{n-1} \beta_{n-1} \chi_2 \psi_{n-1}$ . Теперь вероятность нахождения системы в возбужденном состоянии  $P_2$ , как это следует из (18.38) и (18.36), равна  $4\alpha_{n-1}^2 \beta_{n-1}^2$ , т. е.  $\gamma^2 n / \Omega_{n-1}^2$ . В любой другой момент времени

$$P_2(t) = (\gamma^2 n / \Omega_{n-1}^2) \sin^2(\Omega_{n-1} t) \sim n t^2 \quad (\text{для малых } t).$$

Проведя те же выкладки, что и в случае невозбужденного резонатора, приходим к следующему заключению: если система первоначально не возбуждена, то со временем  $P_2$  линейно возрастает со скоростью, определяемой средним значением  $n$  для тех осцилляторов, которые находятся в резонансе с системой.

Теперь, рассуждая аналогично, для начального состояния  $a_2 \chi_2 b_n \psi_n$  мы получим такое же выражение, как (18.59), за исключением того, что в нем содержатся не  $\psi_{n-1}$  и  $\psi_n$ , а  $\psi_n$  и  $\psi_{n+1}$ . Вероятность того, что система окажется невозбужденной  $P_1$ , снова линейно растет. Однако скорость теперь определяется средним значением  $n+1$ , а не  $n$ .

Ход изменений  $P_1$  и  $P_2$  для ансамбля теперь становится понятным — беспорядочность фазовых соотношений исключает интерференционные эффекты. В изменения  $P_1$  и  $P_2$  вносят независимые вклады два процесса:

$$-\dot{P}_2 = \dot{P}_1 = -\bar{n} P_1 / \tau_e + (\bar{n} + 1) P_2 / \tau_e = (\bar{P}_1 - P_1) / \tau_e', \quad (18.60)$$

где  $\tau_e' = \tau_e / (2\bar{n} + 1)$ , а  $\tau_e$  — время затухания спонтанного излучения в полном резонаторе.  $\bar{P}_1$  — равновесное значение  $P_1$ , причем

$$\bar{P}_1 = \frac{\bar{n} + 1}{2\bar{n} + 1} \quad \text{и} \quad \bar{P}_2 = 1 - \bar{P}_1 = \frac{\bar{n}}{2\bar{n} + 1}. \quad (18.61)$$

По формуле Планка,  $\bar{n} = (e^{2\Delta_0 / (k_B T)} - 1)^{-1}$  и в соответствии с бальмановским распределением

$$\bar{P}_1 \bar{P}_2 = 1 + 1/\bar{n} = e^{2\Delta_0 / (k_B T)}.$$



Это является основанием для замены  $\zeta_0$  в (18.53) на  $-1$ . Однако следует также заметить, что стимулированные процессы, возникающие в результате возбуждения мод резонатора, ускоряют процесс установления равновесия и что  $\tau_e$  в (18.53) следует умножить на  $1/(2\bar{n}+1)$ , т. е. на  $\text{th}[\Delta_0/(k_B T)]$ . То же самое относится и к  $\tau_p$ , которое остается равным  $2\tau_e$ , хотя, чтобы доказать это, пришлось бы учесть фазовую корреляцию между  $a_1$  и  $a_2$ , иначе затухание осцилляций диполя отсутствовало бы.

Зависимость  $\tau_e$  от  $\bar{n}$ , а вследствие этого и от окружающей температуры контрастирует с постоянством  $\tau_e$  для гармонического вибратора. В самом деле, температурная зависимость скорости перехода между любыми двумя уровнями совершенно одинакова для обеих систем. Но с ростом  $T$  число занятых уровней вибратора порционально возрастает и увеличившееся из-за этого число переходов, необходимых для достижения равновесия, служит компенсацией за большую скорость. Ничего подобного, разумеется, не может случиться для двухуровневой системы.

В отношении энергии вывод из приведенных в этом параграфе рассуждений подтверждает анализ Эйнштейна (см. § 16.5), согласно которому в (18.60) величины, пропорциональные  $\bar{n}$ , относятся к стимулированным процессам, в то время как дополнительная величина  $P_2/\tau_e$  — к спонтанному уменьшению возбуждения.

В то время, когда была написана работа Эйнштейна, использованная Бором в квантовой теории, практически ничего нельзя было сказать о таких линейных функциях отклика, как колебания диполя. Было бы заманчиво предположить, что импульсный отклик оставляет колебания незатухающими до тех пор, пока внезапный переход, подобный рассмотренному Бором, не остановит их полностью. Случайное наступление подобных переходов в среднем привело бы ансамбль систем к экспоненциальному затуханию, но не с постоянной времени  $\tau_p$ , а с той же постоянной времени  $\tau_e$  или  $\tau_e''$ , что и для энергии. Поэтому для визуализации процессов модель Эйнштейна должна применяться с осторожностью, а не вслепую. При осторожном же обращении она оказывает реальную помощь исследователю. И, конечно же, она имела огромное историческое значение.

### 18.7. ВОСПРИИМЧИВОСТЬ, ЗАВИСЯЩАЯ ОТ ЧАСТОТЫ

Уравнения Блоха (18.53) с их решением (18.55) для  $\rho_0 e^{-i\omega t}$  при наложении поля  $E_0 e^{-i\omega t}$  приводят к комплексной восприимчивости  $\chi(\omega) = \rho_0 \rho_0 / E_0$ , явно имеющей резонансный характер для случая одинаковых потенциальных ям.

В случае неодинаковых потенциальных ям в уравнения Блоха следует внести разнообразные изменения в деталях, в которых предстоит разобраться читателю самому. При этом нужно иметь в виду ряд моментов. Из системы уравнений (18.26) следует, что в представлении на рис. 18.4, а уравнения движения системы без

потерь остаются неизменными по форме, несмотря на то что роль  $\omega_0$  теперь выполняет величина  $2E/\hbar$ , а  $\rho_0$  нужно заменить на  $\rho_{12}$ , т. е. на  $\rho_0 \Delta_0 / E$  [см. (18.19)].

Переходя к (18.53), заметим, что  $\tau_p$  и  $\tau_e$  (а лучше  $\tau_p'$  и  $\tau_e'$ ) следует умножить на  $\Delta_0 / E$  и что  $\zeta_0 = -\text{th}[E/(k_B T)]$ . Последнее замечание важно, поскольку теперь  $\zeta$  вследствие зависимости  $E$  от  $\omega$  совершает колебания. А так как  $\langle p \rangle$  получено при проектировании на наклонную плоскость, то эти колебания  $\zeta$  вносят вклад в восприимчивость. Он на самом деле такой же, как и для функции ступенчатого отклика (см. рис. 18.3, б), но с измененной базовой линией. Причина, по которой мы не будем детально разбирать этого подхода к решению данной задачи, в том, что легче провести различные модификации функции отклика и из нее вывести  $\chi(\omega)$ . Так, положив  $f$  равной  $\text{th}[E/(k_B T)]$  и считая, что колебания обладают соответствующим затуханием, получим, что (18.29) дает нам первое слагаемое в (18.62). Второе слагаемое плавно возрастает от 0 до конечного значения  $[\Delta^2 \rho_0^2 / (E^2 k_B T)] \text{sech}^2[E/(k_B T)]$  со скоростью, равной  $-(\Delta \rho_0^2 / E) d\zeta_0 / d\Delta$ .

Единичное поле меняет равновесное значение  $\zeta_0$  на  $\rho_0 d\zeta_0 / d\Delta$ , проекция этого выражения на наклонную плоскость дает изменение  $\langle p \rangle$ , кратное  $-\rho_0 \Delta / E$ . Таким образом,

$$S(t) = (\Delta_0^2 \rho_0^2 / E^3) \text{th}[E/(k_B T)] [1 - e^{-Et/(\Delta_0 \tau_p')} \cos(2Et/\hbar)] + [\Delta^2 \rho_0^2 / (E^2 k_B T)] \text{sech}^2[E/(k_B T)] (1 - e^{-Et/(\Delta_0 \tau_e')}). \quad (18.62)$$

Импульсный отклик — это производная функция  $S(t)$  по  $t$

$$h(t) \approx [2\Delta_0^2 \rho_0^2 / (\hbar E^2)] \text{th}[E/(k_B T)] e^{-Et/(\Delta_0 \tau_p')} \sin(2Et/\hbar) + [\Delta^2 \rho_0^2 / (E \Delta_0 k_B T \tau_e)] \text{sech}^2[E/(k_B T)] e^{-Et/(\Delta_0 \tau_e')} \quad (18.63)$$

при условии, что  $E\tau_p/\hbar \gg 1$  и колебания затухают слабо. Окончательно в соответствии с соотношением (5.4) получаем, что восприимчивость  $\chi(\omega)$  представляет собой разложение  $h(t)$  в ряд Фурье:

$$\chi(\omega) = \int_0^\infty h(t) e^{i\omega t} dt \doteq [4\Delta_0^2 \rho_0^2 / (\hbar E)] \text{th}[E/(k_B T)] / [\omega^2 - 4E^2/\hbar^2 + 2i\omega E/(\Delta_0 \tau_p)] + [\Delta^2 \rho_0^2 / (E^2 k_B T)] \text{sech}^2[E/(k_B T)] / (1 - i\omega \Delta_0 \tau_e / E). \quad (18.64)$$

Мнимая часть  $\chi$  показана на рис. 18.3, в. Кривая имеет два пика, соответствующих слагаемым в (18.64). Первое слагаемое дает пик в правой части графика. Это типичная кривая лоренцевского резонанса в центре в  $2E/\hbar$ . Ее полуширина составляет  $2E/(\Delta_0 \tau_p)$ . В левой части графика — релаксационный пик дебаевского типа [3]. Он обусловлен вторым слагаемым. Оба пика срав-



нимы по ширине, но сильно различаются по форме, хотя на графике зависимость  $\chi''$  от  $\lg \omega$  видна не так ясно, как зависимость  $\chi''$  от  $\omega$ . Поскольку  $\chi'' = \chi'(0)\omega\tau/(1+\omega^2\tau^2)$ , форму логарифмической зависимости можно получить, заменив  $\ln \omega$  на  $\lambda$ , а  $\ln(1/\tau)$  — на  $\lambda_0$ :

$$\chi''(\lambda) = \chi'(0)e^{\lambda-\lambda_0}/(1+e^{2(\lambda-\lambda_0)}) = \chi'(0)\operatorname{sech}(\lambda-\lambda_0). \quad (18.65)$$

Получается симметричная колоколообразная кривая, по форме напоминающая кривую лоренцевского резонанса, если не обращать внимания на ее ширину: между точками, соответствующими полуширине пика и определяемыми из условия  $\omega\tau = 2 \pm \sqrt{3}$ , находится частотный фактор, равный 13,9.

На логарифмической кривой (см. рис. 18.3, г) релаксационный пик имеет ширину 1,14, каким бы ни было значение  $\tau$ , которое здесь определяет только положение пика ( $\omega\tau = 1$ ). Ширина резонансного пика составляет величину  $\sim 1/Q$ , что значительно меньше ширины релаксационного пика, даже если добротность низкая.

Площадь под каждой кривой на рис. 18.3, г  $\int_0^\infty \chi'' d\lambda$  является общепринятой мерой для напряженности силы процесса. В соответствии с соотношениями Крамерса — Кронига (5.9) (см. § 5.4) эта площадь составляет  $(\pi/2)\chi'(0)$ , где  $\chi'(0)$ , вклад, который процесс вносит в статическую поляризуемость. Таким образом, из (18.64) получаются две величины, которые следует сравнивать с двумя слагаемыми соотношения (18.23):

$$\text{сила резонанса} = [\pi p_0^2 \Delta_0^2 / (2E^3)] \operatorname{th}[E/(k_B T)], \quad (18.66)$$

$$\text{сила релаксации} = [\pi p_0^2 \Delta^2 / (2E^2 k_B T)] \operatorname{sech}^2[E/(k_B T)]. \quad (18.67)$$

Эти силы не зависят от времен релаксации и определяются вероятностью туннелирования, измеряемой  $\Delta_0$ , и асимметрией потенциальных ям  $\Delta$  по отношению к  $k_B T$ . Резонанс имеет наибольшую силу  $\pi p_0^2 / (2\Delta_0)$  при низких температурах и  $\Delta = 0$ . Сила же релаксации равна нулю при  $\Delta = 0$  и  $T = 0$  и имеет максимальное значение  $0,27 p_0^2 / \Delta_0$ , когда  $\Delta = \sqrt{2}\Delta_0$ , а  $k_B T = 2,24\Delta_0$ . При тех же условиях сила резонанса уменьшается до  $0,20 p_0^2 / \Delta_0$  главным образом из-за того, что  $E^3$  заменяется на  $\Delta_0^3$  в знаменателе выражения (18.66). Когда потенциальные ямы заметно отличаются друг от друга, релаксация обеспечивается лишь частицей, туннелирующей из более высокой ямы в более низкую, но этот процесс мало ассоциируется с осциллирующим диполем. В тех случаях, когда температура достаточно высока, чтобы можно было заменить  $\operatorname{th}[E/(k_B T)]$  на  $E/(k_B T)$ , а  $\operatorname{sech}^2[E/(k_B T)]$  на единицу, оба выражения (18.66) и (18.67) дают одну и ту же величину  $\pi p_0^2 \times (2k_B T)^{-1}$ , которая не зависит от  $\Delta_0$  или  $\Delta$ .

Простейшие теории ориентируемых постоянных диполей, как в законе Кюри для парамагнитных материалов или в дебаевском анализе биполярных диэлектриков, предполагают, что статическая восприимчивость обратно пропорциональна температуре. К этому вопросу мы вернемся в дальнейшем, специально для молекулы аммиака.

Релаксационный пик, возникающий вследствие квантово-механического туннелирования между потенциальными ямами, встречается гораздо реже, чем диссипативные пики той же формы, наблюдаемые в диэлектриках [3], магнетиках [4], упругих материалах [5] и во многих других веществах, где экспоненциальное приближение к равновесию после наложения ступенчатого возмущения из-за тепловой активности превышает потенциальный барьер. Эти процессы не сопровождаются каким-либо резонансным поведением и в дальнейшем здесь рассматриваться не будут.

Заметим только, что благодаря действию больцмановского множителя постоянная времени преодоления потенциального барьера при низких температурах быстро возрастает, обычно как  $\exp(T_0/T)$ , где  $T_0$  — характеристическая температура, как правило, порядка  $10^4$  К. Однако при квантово-механическом туннелировании можно ожидать более слабой зависимости от температуры. Согласно (18.60),  $\tau_e'$  меняется обратно пропорционально средней энергии (включая нулевую энергию) мод на частоте  $2E/\hbar$ , являющихся «агентами» процесса релаксации. Вследствие спонтанной эмиссии  $\tau_e'$  по мере уменьшения  $T$  стремится к постоянному значению, а не возрастает неограниченно, как это бывает при тепловом возбуждении.

#### 18.8. ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ПОТЕРИ В ПОЛИЭТИЛЕНЕ — ПРИМЕР РЕЛАКСАЦИИ ПРИ ТУННЕЛИРОВАНИИ

При низких температурах чистый полиэтилен, несмотря на то что состоит из длинных цепочек соединений  $-\text{CH}_2-$ , практически не обладает диэлектрическими потерями. При небольшом окислении, связанном с нагреванием в воздухе, такие потери возникают, что очень хорошо согласуется с моделью Дебая и может быть детально объяснено исходя из представления о разреженном распределении потенциала в форме двойных ям, между которыми может туннелировать протон. Химическая конфигурация этих ям неопределенна, что, однако, для нашего рассмотрения не имеет значения. Из анализа свойств вещества ясно, что обе ямы достаточно схожи по глубине, хотя и не вполне одинаковы, так как иначе они не дали бы релаксационного пика.

Экспериментальные кривые изменений  $\chi''/\chi'$  в зависимости от частоты показаны на рис. 18.6, а. На них видны пики на фоне незначительных потерь, точное значение которых хотя и неизвестно, но согласуется с потерями, наблюдаемыми в неокисленном веществе. С поправкой на фон пики хорошо соответствуют



дебаевской модели, описываемой соотношением (18.65). Так, например, полуширина пика достигает значения 14,5, что чуть больше теоретического значения 13,9. Этого не было бы, если бы расхождение времен релаксации различных систем с двумя потенциальными ямами было существенным. Отсюда следует, что все эти системы очень схожи между собой по структуре и окружению. Не нужно, правда, искать глубокий смысл в этом заключении: то обстоятельство, что сама по себе ширина пика Дебая не очень зависит от времен релаксации и, следовательно, от положе-

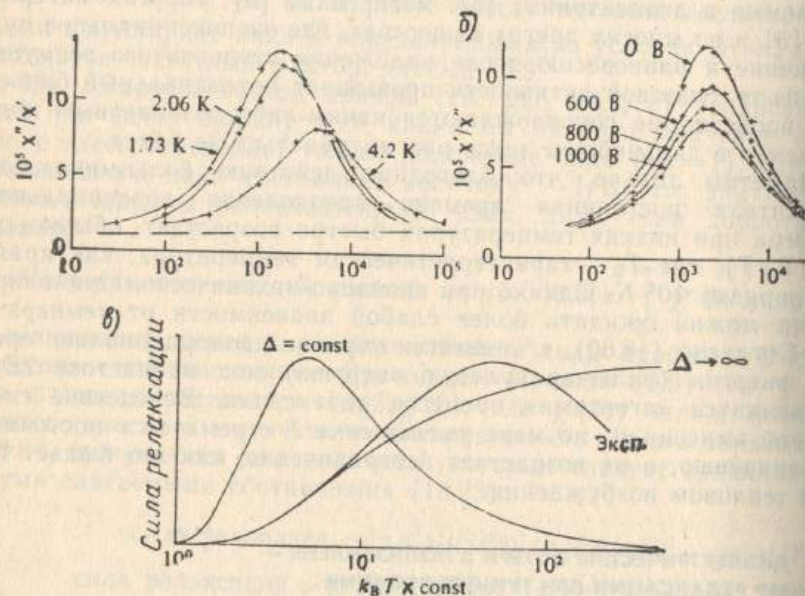


Рис. 18.6. Диэлектрические релаксационные потери (а) в полиэтилене (Филлипс [2]), температуры, при которых производились измерения, указаны возле кривых; б — теоретические кривые для температурных изменений силы релаксации для двух моделей: ансамбля идентичных неравных двойных потенциальных ям ( $\Delta = \text{const}$ ) и ансамбля, имеющего неограниченный диапазон изменений  $\Delta$ . Приведена также экспериментальная кривая (Фрассати и Гильхрист [6]); в — наложение сильного постоянного электрического поля поляризует систему двойных ям и понижает силу релаксации, но не изменяет ее частоту [2]

ния пика, ничего особенного не дает для нашего рассмотрения. Разброс более чем в 1,5 раза не противоречит наблюдениям.

Кривые на рис. 18.6, а показывают, как возрастает сила релаксации с понижением температуры. Однако очевидно, что рост не может продолжаться до нулевой температуры, и характер изменений обнаруживает этот факт. Предположим, а это полностью подтверждено тщательными экспериментальными исследованиями, что системы с двумя потенциальными ямами отличают-

ся друг от друга главным образом своей асимметрией. В идеальном случае  $\Delta = 0$  и потенциальные ямы идентичны, но локальные деформации и другие внешние факторы нарушают распределение потенциала так, что  $\Delta$  будет беспорядочно изменяющейся величиной в сравнительно узком интервале.

Используя выражение (18.67), легко рассчитать, как будет меняться с изменением температуры площадь под кривой релаксационных потерь для данного спектра  $\Delta$ . Два предельных случая показаны на рис. 18.6, б: один — для постоянного значения  $\Delta$ , другой — для равномерного разброса  $\Delta$  от  $-\infty$  до  $+\infty$ . Кривые изображены в одинаковом масштабе по высоте пика, так же представлены экспериментальные данные. Наблюдаемое экспериментальное уменьшение силы релаксации для высоких температур указывает на то, что разброс  $\Delta$  конечен. Поведение кривой при очень низких температурах, которое доминирует в системах со значениями  $\Delta$ , близкими к нулю, показывает, что ограниченный разброс  $\Delta$  вокруг нуля является более предпочтительной моделью, чем модель с единственным ненулевым значением  $\Delta$ . Величина температурного диапазона, в котором сила релаксации обращается в нуль по мере снижения  $T$ , является наиболее очевидным критерием выбора  $\Delta_0$ , в то время как спад кривой на высоких температурах дает хорошее представление о пределах изменения  $\Delta$ . Для данного образца исчезновение релаксации на низких температурах хорошо заметно при 0,1 К. Полную зависимость от температуры можно получить, положив  $\Delta_0/k_B$  равным 0,045 К (расщепление уровня в  $7,8 \cdot 10^{-6}$  эВ, соответствующее резонансной частоте возбуждения верхнего уровня 1,9 ГГц, когда изменения  $\Delta$  проходят в интервале около  $\pm 70\Delta_0$ , который все еще очень мал по сравнению с фактической энергией  $\pm 5 \cdot 10^{-4}$  эВ).

Если температура настолько низка, что  $k_B T$  заметно меньше диапазона изменений  $\Delta$ , то эффект действия постоянного поля умеренной напряженности состоит в смещении всех  $\Delta$  на  $p_0 \cdot E$ . Восприимчивость заметно не меняется, так как процесс состоит только в замене одного набора поляризуемых систем, а именно тех, для которых  $E_B \ll k_B T$ , на другой, фактически эквивалентный набор. Однако достаточно сильное поле исключает из рассмотрения все системы, для которых значение  $\Delta$  меньше  $k_B T$ . На практике системы ориентированы беспорядочно, так что некоторые из них почти перпендикулярны  $E$  и поэтому оказываются не вовлеченными в процесс. Тем не менее уменьшение силы релаксации при наложении постоянного электрического поля отчетливо видно на рис. 18.6, в. Сочетание этой информации с оценкой интервала изменений  $\Delta$ , полученной из температурной зависимости, позволяет получить, как следствие, значение  $p_0$  и таким образом отделить потенциальные ямы друг от друга.

Далее, согласно соотношению (18.13), резонансная частота определяется вероятностью туннелирования. Следовательно, теперь можно определить высоту потенциального барьера.



Проведенное рассмотрение свидетельствует о том, что существуют доступные способы экспериментального определения параметров системы. В итоге мы получаем модель потенциала, которая не только обладает необходимыми свойствами для объяснения всех количественных данных, но одновременно представляет собой вполне реальную двойную яму таких размеров и с таким барьером, который можно было бы ожидать для протона (т. е. иона водорода) в гипероксидной группе —ООН. Предполагается, что именно эта группа является одним из источников двойных потенциальных ям.

Частота, на которой возникает релаксационный пик, определяется характером взаимодействия двойной потенциальной ямы с тепловыми колебаниями ее окружения. Это происходит потому, что именно эти колебания поставляют или отбирают энергию, действующую в переходах между уровнями, именно они восстанавливают и поддерживают состояние равновесия. Расчет показывает, что при низких частотах (1,9 ГГц) и небольшом дипольном моменте ( $6 \cdot 10^{-30}$  Кл·м) постоянная времени установления равновесия вследствие спонтанного электромагнитного излучения слишком велика (около 40 лет), чтобы ее стоило учитывать. Однако из разброса значений  $\Delta$  для идентичных в остальном систем известно, что деформация приводит к такому изменению потенциала, которое вызвало бы поляризующее электрическое поле, обусловленное деформацией решетки. Таким образом, распределение потенциала в виде двойной ямы связано с колебаниями решетки (фононами) полимера-хозяина, и вследствие этого процесс туннелирования относится к процессам, поддерживаемым фононами.

Для фононов или фотонов, не обладающих дисперсией, плотность состояний  $g$  на заданной частоте обратно пропорциональна кубу скорости волны  $v_s$ , которая для полиэтилена в  $2 \cdot 10^5$  раз меньше  $c$ . Если бы одна-единственная упругая мода давала такое же значение  $\Delta$ , что и электромагнитная мода с той же плотностью энергии, то обе волны одинаково взаимодействовали бы с системой двух ям и изменение  $g$  уменьшило бы постоянную времени на  $(v_s/c)^3$ , т. е. с 40 лет до  $2 \cdot 10^{-7}$  с.

На самом деле связь с деформацией решетки должна быть заметно меньшей не только потому, что постоянная времени при самых низких температурах (где доминируют спонтанные процессы) в  $10^3$  раз больше этой величины, но и потому, что в противном случае было бы трудно понять ограничение диапазона изменений  $\Delta$ . При охлаждении в результате анизотропного сжатия в полимере должны возникать деформации порядка 1%, что отвечает объемной плотности энергии примерно  $10^5$  Дж·м<sup>-3</sup>. Электрическое поле  $E = 1,5 \cdot 10^8$  В·м<sup>-1</sup>, имеющее такую плотность энергии, давало бы значение  $\Delta = 6 \cdot 10^{-3}$  эВ, что в 10 раз больше наблюдаемого значения. Поскольку постоянная времени меняется обратно пропорционально квадрату константы связи, коэффициент принимает значение  $10^2$ , а не  $10^3$ . Из приведенных рассуждений, несмотря

на их приближенность, вырисовывается достаточно хорошее соответствие эксперимента.

Заслуживает внимания еще один, последний, момент. Вследствие разброса значений  $E$  от  $\Delta_0$  до  $70\Delta_0$ , а значит, и разброса резонансной частоты диапазон значений времен релаксации очень узок, что нуждается в объяснении. Фактически это обстоятельство автоматически вытекает из предложенного механизма связи. Мы видели, что  $\tau_e$  для систем с одинаковыми потенциальными ямами при учете из различий уменьшается до значений  $\tau_e \Delta_0/E$  и что время релаксации в присутствии теплового излучения (в данном случае — фононов) уменьшается пропорционально  $1/(2\bar{n}+1)$ . Следовательно, можно ожидать, что  $\tau_e \Delta_0/E(2\bar{n}+1)$ . Но  $2\bar{n}E$  в точности равно  $k_B T$  для осцилляторов, уровни которых отличаются на  $2E$ , поэтому  $\tau \sim \tau_e \Delta_0/(k_B T)$ .  $\Delta$  обращается в нуль и  $\tau$  принимает одно и то же значение во всех случаях.

#### 18.9. ДРУГИЕ ПРИМЕРЫ ДВУХУРОВНЕВЫХ СИСТЕМ. АММИАК

Ионизированная молекула водорода  $H_2^+$  с одним электроном, движущимся в поле двух протонов, — самый простой пример, который можно подобрать. Его неоднократно применяли для подробных расчетов на ранних стадиях развития квантовой механики. Энергию можно снизить, предположив, что электрон взаимодействует с обоими протонами, а не связан только с одним из протонов. Тогда волновая функция электрона в основном состоянии симметрична и описывает связанное состояние иона. В этом случае потенциальный барьер легкопреодолим и в равновесной конфигурации минимум  $\psi\psi^*$  между протонами становится неглубоким.

Значительное число молекул [7] характеризуются многообразием стабильных конфигураций и могут переходить из одного состояния в другое либо за счет туннельных эффектов, либо поверх барьера за счет теплового возбуждения. Для этана  $H_3C \cdot CH_3$  две конфигурации, показанные на рис. 18.7, а, б, отличаются по энергии примерно на  $1/8$  эВ, что соответствует температуре 1500 К. Группы  $CH_3$  могут поворачиваться на угол  $120^\circ$  от одного стабильного положения (типа б) к другому за счет прохождения поверх потенциального барьера или туннелирования через него. Частота туннелирования примерно в 100 раз (10 ГГц) ниже частоты крутильных колебаний вокруг устойчивого положения. Основное состояние слегка расщеплено, но не настолько, чтобы сильно изменить энергию связи.

В диметил-ацетилене  $H_3C-C \equiv C-CH_3$  группы  $CH_3$  сильнее отдалены друг от друга, а потенциальный барьер гораздо меньше. В этом случае хорошее приближение для энергии дает предположение, что группы свободно вращаются, имея незначительную поправку на корреляцию своих угловых положений.



Затруднительное вращение групп  $\text{CH}_3$ , подобных рассматриваемым, или полимерной цепи типа  $(\text{CH}_2)_n$  вокруг любой связи  $\text{C}-\text{C}$  делает возможным большое разнообразие стабильных молекулярных конфигураций, мало отличающихся друг от друга по энергии и разделенных потенциальными барьерами. Хотя эти конфигурации важны для химика-органика, для наших целей они слишком сложны и мало что объясняют в явлении туннелирования.

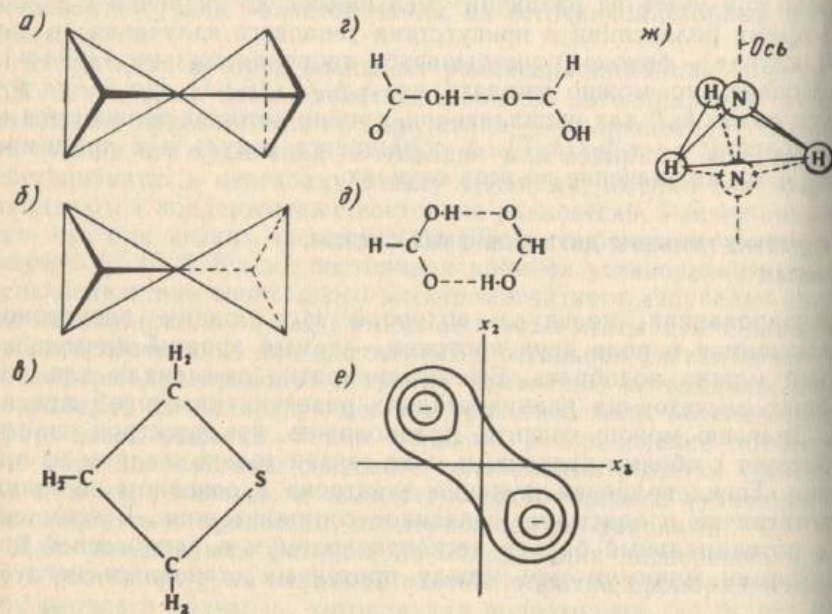


Рис. 18.7. Две конфигурации молекулы этана  $(\text{CH}_3)_2$  в виде тетраэдров с атомами углерода в центрах, соединенных единственной водородной связью в точках контакта, и атомами водорода в свободных точках (а — цисконфигурация — треугольники с атомами водорода на концах ориентированы одинаково, б — трансконфигурация, характеризующаяся меньшей энергией, — треугольники развернуты на  $60^\circ$ ); в — триметиловый сульфид, потенциальный минимум для атома серы лежит точно над или под плоскостью чертежа; г — две молекулы муравьиной кислоты, связанные единственной водородной связью; д — две молекулы муравьиной кислоты, связанные двумя водородными связями; е — схематическое представление поверхностей потенциальной энергии для случая д, ж — тетраэдная структура аммиака, характеризующаяся двумя эквивалентными энергетическими минимумами для атома азота относительно треугольника, образованного атомами водорода

Переход от одной конфигурации к другой предполагает слишком большие перемещения большого числа массивных атомов и в нормальных условиях совершается только за счет теплового возбуждения. С другой стороны, для аммиака и триметиленсульфида, у которых при связывании двух противоположных эквивалентных конфигураций происходит расщепление основных состояний,

наблюдается явно заметное туннелирование. Ввиду важной роли, которую аммиак играет в создании мазеров (об этом речь пойдет в гл. 20), мы уделим ему особое внимание и несколько слов скажем о триметиленсульфиде.

Кольцо из трех углеродных атомов и одного атома серы (рис. 18.7, в) обладает минимумом энергии, когда он согнуто (сморщено). Можно представить себе, что атомы углерода фиксированы, а атом серы движется перпендикулярно чертежу в симметричной двойной потенциальной яме, горб которой лежит в плоскости углеродных атомов. Это представление подчеркивает трудности, наблюдаемые при туннелировании атома серы из одной ямы в другую. Когда молекула свободна, атомы углерода тоже движутся, а атом серы ведет себя так, будто бы его масса значительно меньше реальной. Не станем выводить нужную поправку — она совершенно аналогична поправке к уменьшению массы, вызываемой ядерным движением в теории энергетических уровней для водородоподобных атомов, и ее нетрудно вычислить.

Поскольку молекула имеет компоненту дипольного момента, перпендикулярную плоскости углеродных атомов и меняющую свое направление после того, как атом серы изменит свое положение, процесс туннелирования приводит к осцилляциям дипольного момента и переходам между симметричным основным и антисимметричными состояниями с энергией выше  $3,4 \cdot 10^{-5}$  эВ, которые можно наблюдать как линию поглощения на частоте 8,2 ГГц в микроволновой части спектра. Напротив, если атом серы заменить атомом кислорода, то барьер окажется настолько низким, что основное состояние будет находиться над ним. Однако его присутствие легко обнаруживается в микроволновой части спектра вблизи частоты 25 ГГц, так как колебания кислородного атома в высшей степени ангармоничны.

Есть еще один пример, о котором стоит упомянуть, несмотря на то что его экспериментальное подтверждение не так уж просто. Карбоксильные кислоты имеют тенденцию образовывать димеры, простейший среди них — димер муравьиной кислоты  $\text{НСООН}$ . Если бы димер был устроен так, как показано на рис. 18.7, г, то благодаря водородной связи протон, оказавшись гораздо ближе к атому углерода своей молекулярной группы, чем к другому, находился бы в простой потенциальной яме. Электростатическое отталкивание препятствует его перемещению в другую молекулу. Однако затруднение исчезает, когда образуются две водородные связи (рис. 18.7, д). Существуют две эквивалентные конфигурации, являющиеся зеркальными отображениями друг друга, и, вероятно, скорее всего они, а не конфигурация с двумя протонами, расположенными посередине, являются состояниями с наименьшей потенциальной энергией. Это дает такую модель туннелирования, в которой два атома туннелируют одновременно. Она служит иллюстрацией для других, может быть, даже более сложных случаев, когда в туннелировании принимает учас-



тие более двух атомов, а число путей, связывающих стабильные состояния, превышает единицу.

Для иллюстрации основных положений применимо упрощенное представление. Так как временной масштаб туннелирования протона замедлен по сравнению с другими колебательными процессами и перегруппировками электронов, адиабатическая аппроксимация Борна—Оппенгеймера [8] позволяет нам предположить, что у остальной части молекул достаточно времени, чтобы приспособиться к изменениям вероятностного распределения протонов. Это позволяет рассматривать их движущимися в потенциальном поле, однозначно описываемом определенной функцией их координат.

Можно и дальше упрощать задачу, считая движение протона одномерным вдоль линии, соединяющей кислородные атомы. Тогда задача сводится к движению частицы с массой протона по плоскости с потенциалом  $V(x_1, x_2)$ , где  $x_1$  и  $x_2$  — координаты двух протонов.

Об общем виде зависимости  $V(x_1, x_2)$  легко догадаться. Минимум должен быть только в точках, соответствующих стабильным конфигурациям, и нигде больше (рис. 18.7, д). Любое отклонение от линии  $x_1 + x_2 = 0$  означает различный суммарный заряд на обеих молекулах и дополнительную электростатическую энергию, так что центральное положение  $x_1 = x_2 = 0$ , по всей видимости, является седлообразной точкой  $V$ , как показано на рис. 18.7, е.

Теперь одновременное туннелирование обоих протонов описывается простой моделью двух потенциальных ям, причем ямы удалены друг от друга в  $\sqrt{2}$  раз больше, чем стабильные положения отдельных протонов. Это позволяет уменьшить вероятность туннелирования в такое число раз, во сколько она изменилась бы при увеличении массы туннелирующих частиц вдвое, но при сохранении первоначального разделения ям. При туннелировании энергия основного состояния немного понижается по сравнению с находящимся чуть выше антисимметричным состоянием и соответствует симметричной волновой функции. Для обоих состояний  $\psi\psi^*$  имеет равные максимумы в потенциальных ямах, и поэтому можно сказать: если один протон окажется смещенным вправо, то существует большая вероятность смещения второго протона влево, и наоборот. Обе конфигурации равновероятны.

В смеси двух состояний происходит периодический взаимобмен конфигурациями, однако связанного с этим процессом колебательного диполя не существует. Есть только квадруполь, очень слабо связанный с электромагнитным полем, который, естественно, трудно обнаружить.

А теперь обратимся к имеющему для нас особое значение аммиаку. Ему традиционно приписывается структура тетраэдра, изображенная на рис. 18.7, ж. Соображения симметрии не требуют, чтобы центр инерции отрицательного заряда совпадал с

центром инерции положительного. Значит, следует ожидать, что появится дипольный момент, ориентированный вдоль оси молекулы. Действительно, измерения приводят к значению дипольного момента 1,48 единицы Дебая, или  $4,94 \cdot 10^{30}$  Кл·м, что эквивалентно смещению одного электрона на 0,03 нм (около половины радиуса Бора). Но эта модель уж слишком классическая, так как такую же структуру можно получить, переместив атом азота через плоскость водородных атомов в противоположное зеркальное положение. Совершенно очевидно, что эта инверсия легко осуществляется при туннелировании. Исходя из сказанного в последнем параграфе можно предположить, что важна только координата, определяющая положение атома азота на линии, перпендикулярной треугольнику водородных атомов и проходящей через его центр. Если масса атома азота равна  $m_N$ , а масса атома водорода  $m_H$ , то эффективная масса туннелирующей частицы будет составлять  $m^*$ , где  $1/m^* = 1/m_N + 1/(3m_H)$ , т. е.  $m^* = 2,5$  водородных масс.

Химические данные, благодаря которым тетраэдная структура столь естественна, сейчас должны быть интерпретированы как основание для выбора модели потенциала в форме двух эквивалентных потенциальных ям, разделенных барьером. Основное состояние описывается симметричной волновой функцией. Антисимметричное состояние расположено несколько выше основного. Несмотря на то что ни одно из состояний само по себе не имеет дипольного момента, их суперпозиция приводит к появлению колебательного момента, направленного точно вдоль упомянутой линии. Явление инверсии подразумевало расщепление спектральной линии аммиака в инфракрасной области спектра. Оно подверглось обстоятельному теоретическому изучению, прежде чем было непосредственно обнаружено в микроволновом диапазоне, как линия поглощения с частотой примерно в 24 ГГц, возникающая в результате прямого перехода между расщепленными уровнями. Это произошло в 1934 г. с помощью самого примитивного оборудования и явилось первым успехом микроволновой спектроскопии.

После 1945 г. поглощение при низких давлениях стало возможным изучать с помощью более совершенного оборудования. Тогда же установили, что спектр поглощения аммиака содержит много линий. Их было обнаружено более 60, около половины из них показано на рис. 18.8. Они возникают потому, что многие линии вращательных связей состояний молекул, возбуждаемых при обычных температурах, подвергаются различным центробежным возмущениям. Вследствие этого для каждого вращательного состояния потенциальный барьер и расщепление уровней различны. Кроме того, ядро азота имеет квадрупольный момент, который взаимодействует с полем атомов азота. Есть и другие внутренние эффекты. К счастью, вызываемые ими осложнения не на-



рушают простоты последующих рассуждений; но мы ненадолго вернемся к ним в следующей главе.

С первого взгляда кажется, что существует противоречие между идеей расположения постоянного диполя и симметрией распределения заряда в стационарных состояниях. Однако противоречие устраняется расчетом, который показывает, что поляризация, вызванная электрическим полем в первоначально неполяризованном стационарном состоянии, похожа на поляри-

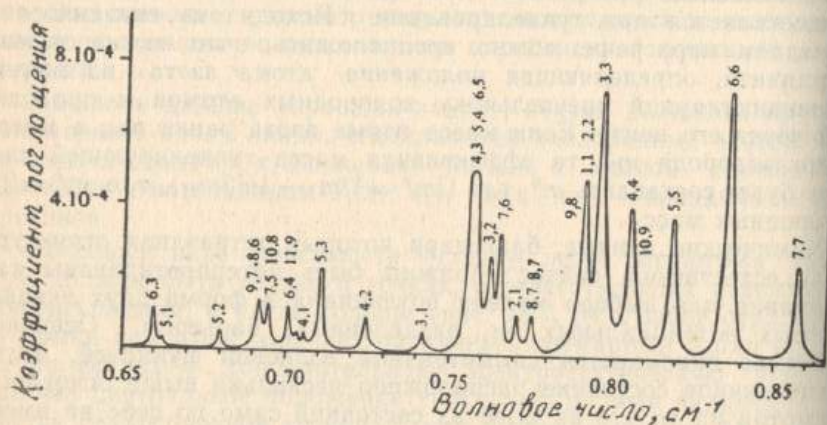


Рис. 18.8. Спектр поглощения в аммиаке в микроволновой области при комнатной температуре и давлении 1,2 Торр (Блиней и Пенроз [9])

зацию, вызываемую ориентацией постоянных диполей при условии, что  $k_B T$  превышает уровень расщепления. Необходимые вычисления уже выполнялись для системы двух потенциальных ям. Если ямы одинаковы, то в соответствии с (18.23)

$$\bar{\alpha} = (p_0^2 / \Delta_0) \operatorname{th} [\Delta_0 / (k_B T)] \approx p_0^2 / (k_B T)$$

при условии, что  $k_B T \gg \Delta_0$ . А это как раз то, что получено для постоянного диполя, который может иметь две ориентации: либо вдоль поля, либо в противоположном направлении. Если  $E$  мало, то оба состояния будут заполнены пропорционально  $e^{\pm p_0 E / (k_B T)}$  или  $1 \pm p_0 E / (k_B T)$ . Избыток  $p_0 E / (k_B T)$  вдоль поля приводит к средней поляризуемости  $p_0^2 / (k_B T)$ . В случае аммиака, для которого  $\Delta_0 / k_B \sim 0,6$  К, обе модели фактически приводят к одному и тому же значению  $\alpha$  для всех температур, превышающих 2 К.

Этот пример иллюстрирует несущественность для многих практических приложений, казалось бы, фундаментального различия между классической и квантовой точками зрения на симметрию. Волновая функция основного состояния аммиака типична для многих основных состояний, отражающих симметрию потенциала.

Если потенциал представляет собой симметричную двойную яму, то  $\psi$  симметрична во всех стационарных состояниях. Но с классической точки зрения, частица должна покоиться в одной из ям, а не быть одновременно в обеих. При столь высоком потенциальном барьере, когда нужно год ждать наступления туннелирования сквозь него, было бы слишком педантично требовать интерпретации наблюдения частицы в одной яме через суперпозицию двух состояний, различающихся по энергии на  $10^{-41}$  Дж, пока нет способов разделения этих состояний и достаточной свободы от температурных возмущений в течение времени, которое превышает время туннелирования. В этом случае расщепление энергетического уровня соответствует температуре  $10^{-18}$  К и только фантазия позволяет считать, что «правильная», поддерживающая симметрию квантовая картина имеет какие-либо преимущества перед отвергающей симметрию классической картиной.

Что касается поведения молекул аммиака, находящихся в достаточно тесном контакте с окружающей средой, температура которой значительно превышает 2 К, то аргументация, подобная приведенной выше, убеждает, что классическая картина отвечает предъявляемым требованиям и ее легче использовать, чем квантовую.

Теперь нетрудно изолировать эти молекулы на время более длительное, чем время туннелирования, равное  $10^{-11}$  с. При низких частотах инверсии радиационная связь молекул с окружающей средой чрезвычайно слаба, и только при достаточно низком давлении среднее время между соударениями превышает время туннелирования.

В аммиачном лазере [10] микроволновой резонатор возбуждается колебаниями молекул, приходящих через него в антисимметричном состоянии и стимулируемых к переходам в основное состояние. Действие лазера таким образом сводится к возможности разделения молекул в симметричном и антисимметричном состояниях и изоляции молекул на достаточно длительное время, чтобы успеть использовать специально созданную популяцию антисимметричных состояний. Ну а теперь нужно все-таки отказаться от классической картины и подумать о квантовом описании.

Аммиачному лазеру посвящена практически вся гл. 20. Однако ввиду того, что процесс разделения состояний тесно примыкает к обсуждаемой системе с двумя потенциальными ямами, будет целесообразно описать его здесь. В первоначальных вариантах лазера разделение осуществлялось с помощью электростатической линзы. При этом использовалась положительная поляризуемость симметричного состояния и равная ей, но противоположная по знаку поляризуемость антисимметричного состояния  $\alpha = \pm p_0^2 / \Delta_0$  в соответствии с (18.21). В неоднородном электрическом поле энергия молекул в симметричном состоянии снижается, они втягиваются в область более сильного поля, в то время



как энергия молекул в антисимметричном состоянии возрастает, и поэтому они отклоняются.

Электрическое поле  $E$  возбуждает дипольный момент  $\alpha E$ , энергия изменяется на  $\frac{1}{2}\alpha E^2$ , поэтому действующая сила будет равна  $\text{grad}(\frac{1}{2}\alpha E^2)$ .

С помощью конструкции из четырех цилиндрических электродов, расположенных крестообразно, как показано на рис. 18.9, создается поперечное электрическое поле с квадрупольной симметрией.

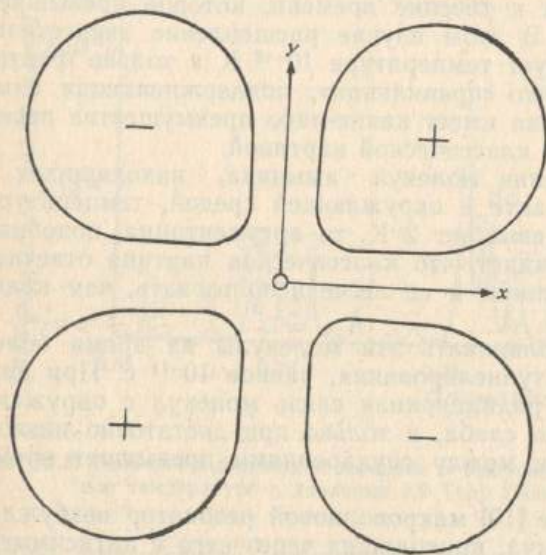


Рис. 18.9. Поперечное сечение квадрупольной электростатической линзы, применявшейся для фокусировки молекул аммиака, находящихся в антисимметричном состоянии (Гордон, Цейгер и Таунс [10])

Обращенные к центру поверхности электродов имеют форму равнобоких гипербол  $xy = \text{const}$ , так что возле оси распределение потенциала будет таким же:

$$V = axy,$$

где  $a = \text{const}$ .

Напряженность электрического поля  $E$ , как известно, есть  $-\text{grad } V$ , т. е.  $-a(y, x)$ , а  $E^2$  в точности составляет  $a^2(x^2 + y^2)$ , т. е.  $a^2 r^2$ . Следовательно, сила, действующая на молекулу, направлена по радиусу. Антисимметричные молекулы она толкает к оси, а симметричные — отталкивает от нее. Если какой-нибудь источник поставит в разреженное пространство линзы пучок атомов, то сфокусируются только те атомы, которые находятся в верхнем состоянии, после прохождения отверстия в диафрагме они окажутся тщательно отсепарированными от атомов, находящихся в основном состоянии.

Чтобы оценить техническую сторону проблемы, рассчитаем расстояние между источником и точкой фокусировки. Уравнение

радиального движения молекулы представляет собой уравнение простого гармонического движения

$$\ddot{mr} = -\text{grad}(\frac{1}{2}p_0^2 a^2 r^2 / \Delta_0) = -p_0^2 a^2 r / \Delta_0.$$

Полупериод равен  $[\pi / (p_0 a)](m \Delta_0)^{1/2}$ . Молекула, движущаяся вдоль оси со скоростью  $v_z$ , за это время перемещается на  $[\pi / (p_0 a)] \times \times (2E \Delta_0)^{1/2}$ , где  $E$  — кинетическая энергия молекулы  $\frac{1}{2}mv_z^2$ , примерно равная  $\frac{1}{2}k_B T$ . В первоначальном эксперименте  $a$  принимало значение  $6 \cdot 10^8 \text{ В} \cdot \text{м}^{-2}$ , а молекулы аммиака брались из резервуара, находившегося при комнатной температуре.

Если для  $p_0$  использовать значение измеренного дипольного момента, а для  $2\Delta_0/h$  — частоту инверсии 24 ГГц, то вычисленное фокусное расстояние составит около 20 см, что очень близко к экспериментально определенному значению. Величина  $a$  заслуживает некоторого комментария: на расстоянии 1 см от оси напряженность поля составляет  $6 \cdot 10^6 \text{ В} \cdot \text{м}^{-1}$ , так что потенциалы электродов были довольно высокими, но не настолько, чтобы привести к пробое.

Следует заметить, что максвелловское распределение по скоростям устанавливает для различных молекул разные фокусные расстояния, так что имеется селекция измеряемых скоростей. Тем не менее скорости молекул, которые фактически поступают в резонатор (и, следовательно, время, необходимое этим молекулам для пролета через него), обязательно имеют широкий разброс. Более того, без детального знания геометрии устройства, в том числе размеров отверстий, нельзя произвести оценку этого разброса. Это создает некоторые ограничения для сравнения теории с известными из публикаций экспериментальными данными, касающимися поведения лазера. Однако, как это выяснится в гл. 20, общие физические принципы представляют собой куда больший интерес, чем детали поведения.



Естественное уширение линий, возникающее вследствие процессов электромагнитного и акустического излучения — единственных до сих пор обсуждавшихся нами причин этого явления, ни в коем случае не исчерпывает все существующие механизмы и, как правило, столь мало, что не имеет практического значения. Можно отличать уширение, связанное с разницей в поведении отдельных членов ансамбля, от уширения, вызываемого каждым членом в отдельности. К первому типу относят доплеровское уширение и уширение, вызванное вариациями окружающей среды, не упоминая об эффектах, связанных с небольшими отличиями различных, внешне схожих систем (например, различных изотопов). Ко второму классу в добавление к процессам излучения необходимо отнести соударения между атомами. Они прерывают или искажают цуг волн, испускаемых отдельной системой (единичным излучателем), что, в свою очередь, приводит к увеличению разброса Фурье-компонент. Имеется обширная литература, посвященная этим вопросам [1], в которой подробно анализируются как расчеты, так и разные трактовки.

Не будем пытаться выйти за пределы элементарного обсуждения и иллюстрации некоторых главных идей примерами того, как можно уменьшить ширину линии или как ее трактовать в случае очень точных измерений основной частоты. Начнем с процессов второго типа. Для наших целей двухуровневая система имеет адекватную модель, практически реализованную в аммиачном лазере.

На рис. 18.8 показан спектр поглощения аммиака при довольно низком давлении 1,2 Торр\* в диапазоне длин волн от 1,1 до 1,5 см. Каждая линия спектра является результатом переходов между парами уровней с различными состояниями вращения молекул, определенными парами квантовых чисел (они указаны над каждой линией). Первое число —  $J$  — определяет полный угловой момент, тогда как  $K$  определяет ту компоненту  $J$ , которая направлена вдоль оси, нормальной к плоскости атомов водорода (как показано на векторной диаграмме рис. 19.1). При  $K=J$  молекула вращается преимущественно возле этой оси и у атомов водорода вследствие центробежных эффектов снижается потенциальный

барьер и увеличивается расщепление пары уровней. Интенсивность эффекта грубо определяется величиной  $J^2$ , что объясняет постепенное увеличение значений от 1,1 до 7,7 в высокочастотной части спектра (см. рис. 18.8). Там, где  $K$  меньше  $J$ , угловой момент имеет также компоненту, направленную вдоль оси, ортогональной к прежней оси. Вызванный этим центробежный эффект удлиняет барьер; таким образом, линии, соответствующие большим значениям  $J$  и малым  $K$ , появляются в левой, низкочастотной, части спектра. Реальные, а не инструментальные ширины линий не влияют по порядку величин больше, чем можно объяснить радиационным или доплеровским уширением; они пропорциональны давлению газа. При давлении 100 Торр (это в 80 раз больше давления, использованного в случае, представленном на рис. 18.8) линии настолько уширяются, что наблюдается их перекрытие. В получающемся спектре поглощения тонкие детали оказываются неразличимыми.

Если в экспериментальном объеме находится лишь небольшое количество аммиака, а давление создается инертным газом, то уширение линий обычно оказывается не столь заметным. Для получения такого же уширения в смеси, в которой преобладает гелий и есть только следы аммиака, требуется давление в 16 раз больше, чем в чистом аммиаке. Величина уширения, наблюдавшаяся в опытах с гелием, близка к той, которую следовало ожидать, если бы каждое соударение атома гелия с молекулой аммиака побуждало последнюю к такому поведению, что ее последующие колебания оказывались бы не согласованными по фазе с тем, что имело место раньше.

Можно предполагать, что ступенчатая функция отклика одной единственной молекулы окажется такой же, как проиллюстрировано на рис. 18.3, а, с пренебрежимо малым затуханием излучения до тех пор, пока соударение не внесет произвольного сдвига фазы. Усредняя по ансамблю таких молекул, в котором все испытывают первое соударение одновременно, можно установить, что цуг волн резко обрывается в этой точке. Но, разумеется, различные молекулы испытывают случайные соударения в различные моменты времени. Поэтому вероятность существования цуга волн в течение времени свыше заданного времени  $t$  убывает экспонен-

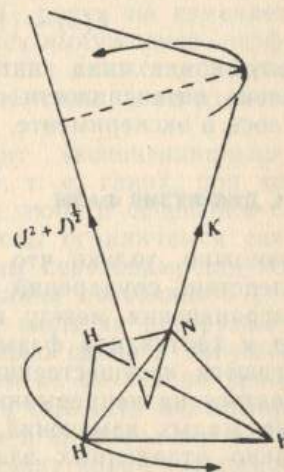


Рис. 19.1. Векторная диаграмма углового момента молекулы аммиака. Полный угловой момент  $(J^2 + J)^{1/2}$  в  $\hbar$ -единицах показан вертикальной линией;  $K$  — компонента вдоль оси молекулы, мгновенное положение которой изображено в основании рисунка;  $K$  прецессирует вокруг оси полного углового момента

\* Торр — внесистемная единица давления, равная  $1/760$  атм; то же, что мм рт. ст.;  $1 \text{ Па} = 7,50 \cdot 10^{-3}$  Торр. Применяется в зарубежной научной литературе.



циально, как  $e^{-t/\tau_c}$ , где  $\tau_c$  — среднее время между соударениями атомов гелия с данной молекулой аммиака. Теория в точности аналогична теории распределения длин свободного пробега в газе. При экспоненциально убывающей функции отклика формальной линии, являясь разложением Фурье, представляет собой лоренциан на средней частоте  $\omega_1$ :

$$I(\omega) \sim [1 + (\omega - \omega_1)^2 \tau_c^2]^{-1}.$$

Полуширина пика интенсивности составляет  $2/\tau_c$  и пропорциональна интенсивности соударений, т. е. давлению, что и наблюдалось в эксперименте.

### 19.1. ДИФФУЗИЯ ФАЗЫ

Возможно, только что приведенное описание уширения линий вследствие соударений дало не много для установления точного разграничения между процессами столкновений, которые приводят к хаотизации фазы, и другими процессами, которые предполагаются несущественными. В действительности нужно ориентироваться на непрерывный ряд фазовых возмущений из-за множества малых изменений, которые возникают вследствие сравнительно отдаленных взаимодействий, а не от катастрофических последствий лобовых столкновений.

Рассмотрим вопрос подробнее, взяв за модель столкновения некоторое влияние (например, действие поля налетающей молекулы), которое вынуждает типичную точку на рис. 18.4 в течение времени столкновения переходить на иную траекторию движения, чем при невозмущенном движении вокруг оси  $\zeta$ . Если возмущение подобно действию приложенного электрического поля, то (как на рис. 18.4, б) это приводит к наклону оси орбиты. Столкновение, совершившееся в течение части периода колебаний на собственной частоте  $2\Delta_0/\hbar$ , эффективно только в том случае, если поле достаточно сильно, чтобы существенно изменить частоту. Это автоматически вызывает наклон орбиты на больший угол. В зависимости от фазы колебаний в момент соударения точка будет смещена вверх, вниз или в сторону. Таким образом, ансамбль молекул, первоначально представленных одной и той же точкой на сфере, вскоре окажется размазанным — он будет представлен облаком точек. Наряду с хаотизацией фазы здесь происходит и хаотизация  $\zeta$ -координаты, а времена продольной и поперечной релаксации  $T_1$  и  $T_2$  при таких сильных столкновениях сокращаются.

Этого и следует ожидать в аммиаке, если налетающая молекула приближается на расстояние 1 нм. При обычных для комнатных температур скоростях молекул  $\sim 700$  м/с наиболее эффективная продолжительность столкновения составляет около 2 пс — время, соответствующее  $1/20$  периода колебаний. Более сильные

соударения происходят за еще более короткое время. С другой стороны, для оптических переходов, имеющих частоту, в  $10^4$  раз большую, за время одного соударения совершается 500 циклов колебаний. В этом случае очень малое изменение частоты при соответственно малом наклоне орбиты может значительно изменить фазу с едва заметным смещением в направлении  $\zeta$ . При таких соударениях  $T_2$  укорачивается, а  $T_1$  почти не изменяется.

По мере того как облако типичных точек вынужденно диффундирует по сфере, центр инерции этого облака движется к центру сферы и соответственно среднее значение силы колебательного диполя на одну молекулу убывает.

Покажем, что это убывание происходит экспоненциально не только для катастрофических соударений, т. е. таких, при которых частица выходит из пучка, но и для любого сочетания слабых и сильных столкновений. Для простоты ограничимся ситуациями, больше относящимися к оптическим переходам, для которых разброс точек происходит вокруг линии постоянного  $\zeta$ . Но все рассуждения можно легко обобщить, включая диффузию по всей поверхности сферы. Необходимо только сделать допущение о том, что положение точки на этой линии не влияет на процесс рассеяния; если  $P(\varphi, \varphi')d\varphi'$  — вероятность того, что в некоторый момент времени точка в  $\varphi$  будет рассеяна в интервал  $d\varphi'$  от точки  $\varphi'$ , то  $P$  имеет вид  $P(\varphi - \varphi')$  и не содержит явной зависимости от  $\varphi$ . Это предположение естественно в том случае, когда соударение длится так много периодов, что точный момент его начала не имеет значения. Мы не считаем, что  $P(\varphi - \varphi') = P(\varphi' - \varphi)$ , поскольку любое электрическое поле лишь увеличивает орбитальную частоту, никогда не уменьшая ее. Было бы ошибкой предполагать равномерность сдвига фазы вперед и назад.

Выразим теперь распределение точек, имеющих плотность  $A(\varphi)$  на линии постоянного значения  $\zeta$ , суммой Фурье:

$$A(\varphi) = \sum_{-\infty}^{\infty} a_n e^{in\varphi} \text{ с } a_{-n} = a_n^*, \quad (19.1)$$

поскольку  $A$  — действительное число.

Заметим, что каждый член этой суммы подвергается разбросу. Плотность, имевшая первоначальное значение  $a_n e^{in\varphi}$ , становится равной  $a'_n e^{in\varphi'}$ :

$$a'_n e^{in\varphi'} = \int_0^{2\pi} a_n e^{in\varphi} P(\varphi - \varphi') d\varphi. \quad (19.2)$$

Если  $P(\varphi - \varphi')$  также выразить суммой Фурье

$$\sum_{-\infty}^{\infty} p_m e^{im(\varphi - \varphi')},$$



то только один член останется после интегрирования:

$$a_n' = 2\pi p_{-n} a_n. \quad (19.3)$$

Форма  $n$ -й компоненты останется неизменной, но ее амплитуда умножается на  $2\pi p_{-n}$ .

Так как в последовательные интервалы времени относительный эффект тот же, то  $a_n$  изменяется экспоненциально:  $a_n \sim e^{-\alpha_n t}$ , где  $\alpha_n$  может быть комплексным и принимает различные значения для каждой Фурье-компоненты  $A(\varphi)$ . Это, однако, не прекращает экспоненциальной релаксации центра инерции, поскольку его положение определяется только одной компонентой. Таким образом,

$$\bar{p} = \bar{\xi} + i\bar{\eta} = \int_0^{2\pi} A(\varphi) e^{i\varphi} d\varphi \bigg/ \int_0^{2\pi} A(\varphi) d\varphi = (a_{-1}/\bar{A}) e^{-\alpha_{-1} t}.$$

В последнее выражение введен соответствующий экспоненциальный декремент. Мнимая часть  $\alpha_{-1}$  меняет частоту колебаний центра инерции по мере того, как он вращается вокруг оси  $\xi$  (т. е. сдвиг центра резонансной линии происходит за счет  $\alpha_{-1}$ ). В свою очередь, действительная часть  $\alpha_{-1}$  определяет лоренцевское уширение.

Следует подчеркнуть, что используемая здесь модель двухуровневой системы, возмущаемой нестационарным электрическим полем, не вполне подходит для описания сложностей, возникающих при соударениях реальных молекул. Целью данного параграфа было показать с помощью специального примера, что экспоненциальный характер функций отклика (и, как следствие этого, лоренцевская форма уширения линии) не является следствием специального механизма соударения, а скорее является нормой. Поэтому непрерывный ряд взаимодействий можно заменить эквивалентной моделью, в которой все близкие столкновения будут рассматриваться как катастрофические, а все остальные вообще не будут учитываться.

Точное определение близкого столкновения должно зависеть от спектра фазовых изменений, особенно если диффузия по сфере осуществляется главным образом малыми шагами. Однако при грубом рассмотрении обычно нет большой ошибки в предположении, что рассеяние типичной точки более чем на один радиан означает катастрофу. Но в тех случаях, когда давление велико и спектральные линии значительно уширены и смещены, в спектрах начинают происходить также такие изменения формы, для которых наша грубая модель не подходит. Эти изменения можно уяснить только на основе очень тщательного анализа механизма соударений.

Довольно общий результат, состоящий в том, что диффузионный разброс типичных точек по сфере приводит к экспоненциальному затуханию осциллирующего диполя, ставит нас перед воп-

росом, можно ли экспоненциальное радиационное затухание, обсуждавшееся в последней главе, описывать аналогично как нарастающую потерю фазовой информации в том случае, когда возмущенная система связана с резонатором. Другими словами, можно ли сохранить представление, свойственное изолированной системе или системе, подверженной действию определенной вынужденной силы, для случаев, когда возмущение возникает в результате взаимодействия с другими квантованными системами? Ответ уже был дан: нельзя. Как только две системы оказываются связанными, их волновые функции должны быть разделены. Если цель состоит в предсказании результата данного эксперимента, то комбинированная волновая функция должна быть сохранена\*.

В этом отношении было бы законно подвергнуть критике последние параграфы, но, по всей видимости, в них нет больших ошибок, потому что они были задуманы с целью провести весьма приближенный анализ. В дальнейшем придется действовать аккуратно, не отвергая, однако, классических моделей, которые до сих пор были полезными (см. § 18.4). Как уже было показано при рассмотрении уравнения Блоха, исходное представление движения по поверхности сферы требовало расширения в тех случаях, когда моды резонатора были связаны с потенциалом в форме двойной ямы, что позволяло типичной точке покинуть поверхность. В следующей главе примерно так же мы обнаружим, что в тех случаях, когда гармонический осциллятор (см. § 20.5) (резонатор) связан с кристаллом или с иной квантуемой системой (молекулами аммиака), эквивалентный классический ансамбль, описанный в гл. 13 (см. § 13.9), остается полезным. Однако модель требует некоторого усовершенствования, учитывающего новые обстоятельства.

Это не означает, что нельзя пользоваться идеей диффузии по сфере как удобным способом для описания эволюции ожидаемого значения дипольного момента или энергии, поставив, таким образом, механизм рассеяния излучения и соударений на какую-то основу. Однако всегда следует помнить, что  $\xi$ -координата типичной точки определяет среднее значение  $p$ . В любом из них частица обязательно окажется в одной из потенциальных ям, а ни в каком другом месте, значения же  $\pm p_0$  являются единственными возможными результатами с вероятностями  $1/2(1 \pm \xi)$ .

Аналогичным образом, статистическое распределение точек, представляющих ансамбль идентичных систем, имеет значение только как способ облегчения вычислений вероятности нахождения заданного числа систем с моментом  $+p_0$  и остального числа

\* Данное положение, особенно в применении к системам, однажды связанным, а затем изолированным друг от друга, встречает инстинктивное противодействие, которое породило множество парадоксов. Таких, например, как парадоксы Эйнштейна, Розена и Подольского [2], выступавших с нападениями (безуспешно) на основы квантовой механики.



систем с моментом  $-p_0$ . По мере увеличения размеров ансамбли распределение вероятностей приобретает острый пик. Если  $\xi$  есть центр инерции  $N$  точек, то  $1/2 N(1+\xi)$  систем окажется в правой яме со среднеквадратичным отклонением от этого значения на величину  $1/2 [N(1-\xi^2)]^{1/2}$ . В большинстве случаев рассматривания макроскопических ансамблей отклонения от среднего значения пренебрежимо малы и только положения центра инерции имеют значения.

## 19.2. УШИРЕНИЕ ШТАРКА И РЕЗОНАНСНОЕ УШИРЕНИЕ

Наблюдения показывают, что уширение спектральных линий в присутствии газа с полярными молекулами оказывается больше по сравнению с газом, молекулы которого неполярны. Это объясняется действием электрического поля диполей, которое может вызвать заметные сдвиги фаз даже в тех случаях, когда сближение не столь велико, чтобы его можно было рассматривать как соударение. Эффект Штарка [3] — смещение спектральной линии сильным однородным электрическим полем — был впервые обнаружен для полей с напряженностью около  $10^7$  В/м. Напряженность поля такого порядка имеет диполь в 1 ед. Дебая на расстоянии 1 нм (см. гл. 17), что составляет несколько типичных атомных радиусов. Свободный электрон или протон обладают подобным полем на расстоянии, в 10 раз большем.

При использовании спектрального анализа для диагностики молекулярных процессов в реальной плазме рассмотрение эффектов, связанных с уширением линий, представляют собой самую настоящую проблему. Не будем много говорить об этом и удовлетворимся переходом к штарковскому уширению, вызываемому полярными молекулами. Чтобы получить количественную меру этого явления, рассмотрим диполь  $p$ , движущийся со скоростью  $v$ , на расстоянии наибольшего сближения, равном  $r$ . Его поле  $p/(4\pi\epsilon_0 r^3)$  можно считать действующим в течение времени порядка  $r/v$ . Установим, каким должно быть сближение  $r$  для того, чтобы результирующее смещение фазы резонансной линии ( $1s \rightarrow 2p$ ) атома водорода составляло 1 рад. Изменение частоты  $\Delta\omega$  этой линии в поле  $E$  составляет  $3\hbar\epsilon_0 E/(2\pi m e)$ . Критическое расстояние будет составлять  $[3\hbar p/(8\pi^2 m e v)]^{1/2}$ , т. е. около  $1/2$  нм, если  $p=1,5$  ед. Дебая, а  $v=700$  м/с. Это больше, чем то, что получается в результате вычислений с использованием модели двух потенциальных ям, для которой при такой напряженности поля эффект был бы довольно слабым и зависел от квадрата  $E$ . По правде говоря, эффект Штарка слишком сложен, чтобы ему удовлетворяли простые модели, и мы сейчас оставим его обсуждение, с тем чтобы вернуться к явлению уширения линий, которое можно продуктивно обсуждать с помощью модели двух потенциальных ям. Имеется в виду резонансное уширение, проис-

ходящее в результате взаимодействия между двумя идентичными или почти идентичными молекулами. Это уширение может быть очень значительным.

Сначала обратимся к чисто классической модели, в которой молекулы заменены идентичными гармоническими осцилляторами, а давление предполагается достаточно низким, чтобы только бинарные столкновения имели значение. Предположим, что действующее ступеньками электрическое поле заставило все элементы системы совершать колебания параллельно  $E$  с одинаковыми амплитудами и фазами. Измеренная функция отклика  $S(t)$  представляет собой сумму индивидуальных откликов. Когда любые два осциллятора сближаются настолько, чтобы оказаться заметно связанными полями своих диполей, то координаты нормальной моды будут представлять собой сумму и разность (алгебраическую сумму) индивидуальных смещений. Амплитуда колебаний остается неизменной. В частности, и упомянутая сумма неизменна по амплитуде. Однако фаза колебаний изменилась. Это вызвано тем, что связывание повлияло на частоту нормальной моды. Если это изменение частоты составляет  $\Delta\omega$  (т. е. если разность частот между двумя нормальными модами равна  $2\Delta\omega$ ), то сдвиг фазы для соударения продолжительностью  $t_0$  будет составлять  $t_0\Delta\omega$ .

Величину  $1/\Delta\omega$  примем за меру продолжительности столкновения, приводящего к рассеянию в 1 рад, т. е. к вкладам в процесс, вносимым теми молекулами, которые можно считать надежно устраненными от участия в отклике. Эффективное сечение соударений можно определить через величины, характеризующие то расстояние сближения, которое необходимо для данного изменения фазы.

Молекулу с единичным оптическим переходом можно моделировать электроном (см. § 13.7), совершающим гармонические колебания с силой осциллятора  $f$ . Если смещения электронов в двух таких сталкивающихся молекулах составляют  $x_1$  и  $x_2$ , то потенциальная энергия связи имеет порядок  $e^2 x_1 x_2 / (4\pi\epsilon_0 r^3)$ . Взаимодействие приводит к тому, что нормальные моды оказываются сдвинутыми относительно среднего значения  $\omega_0$  на  $\pm e^2 / (8\pi\epsilon_0 m r^3 \omega_0)$ . Предполагаемое время столкновения  $r/v$  приводит к сдвигу фазы в 1 рад, если  $r$  равно  $e / (8\pi\epsilon_0 m \omega_0 v)^{1/2}$ , что составляет примерно 0 нм для паров натрия при температуре 1000 К. Считая, что каждый атом при столкновении представляет собой мишень площадью  $\pi r^2$  и что в единице объема содержится  $n$  атомов, получим, что среднее время между соударениями равно  $\tau = 1/(\pi r^2 n \sigma)$ , а ширина линии —  $2/\tau$ . Добавив в это выражение напряженность осциллятора  $f$ , получим, что ширина линии равна

$$n f e^2 / (4\epsilon_0 m \omega_0). \quad (19.4)$$

Разнообразные попытки вычислить ширину линии в этом частном случае привели к сходным выражениям, однако отличаю-



щимся множителями от 1 до 8/3. Экспериментально был установлен коэффициент, приблизительно равный 2. Отсюда следует, что радиус мишени должен быть около 9 нм, что много больше атомного радиуса. Любопытно заметить, что добавление к парам натрия в условиях низкого давления гелия для воспроизведения резонансного эффекта самоуширения давление паров натрия должно быть в 100 раз больше давления гелия. Радиус мишени тогда составляет 0,9 нм. Эта величина все еще больше расстояния сближения, т. е. 0,3 нм, при котором можно было бы говорить о непосредственном соударении. Приходится констатировать, что ответственность за происходящее несет взаимодействие, обусловленное силами Ван-дер-Ваальса, действующими между неполярными молекулами. Произвольно флуктуирующий дипольный момент атома гелия, хотя и меняется с частотой, в десять раз большей частоты излучения, может на этих близких расстояниях воздействовать на атом натрия так, что вызовет существенный сдвиг фазы.

Только что рассмотренная модель идентичных осцилляторов не так уж пригодна для резонансного уширения линий аммиака при таком низком давлении, когда спектральные (см. рис. 18.8) линии хорошо разрешены. Большинство соударений будет происходить между молекулами с различными вращательными состояниями. Сам факт разрешения линий говорит о том, что, прежде чем данная молекула испытает фазовый сдвиг, пройдет достаточно времени, чтобы другие молекулы могли совершить по крайней мере несколько циклов. Таким образом, можно считать, что соударяющиеся молекулы не одинаковы и имеют беспорядочные друг относительно друга фазы. Претерпеваемое каждой молекулой в отдельности изменение фазы имеет большее значение, чем суммарное изменение, как получалось в предыдущем расчете. С другой стороны, длительность соударения гораздо меньше длительности периода и для эффективного дефазирования требуются довольно сильные взаимные возмущения. Поэтому при вычислении сдвига фазы малые разности частот соударяющихся молекул несущественны и во время соударения можно спокойно считать их идентичными.

Рассмотрим далее два гармонических осциллятора, колебательные состояния которых первоначально представлены комплексными амплитудами  $A$  и  $B$ . Амплитуды нормальных мод составят  $(A+B)/\sqrt{2}$  и  $(A-B)/\sqrt{2}$ . Во время столкновений их фазы меняются с различной скоростью, так что пуг верхней моды заканчивается с опережением на  $\theta$ , а нижней — с отставанием на  $\theta$  по отношению к фазе, которую имел бы невозмущенный осциллятор. В конце соударения амплитуды нормальных мод равны  $(A+B)e^{i\theta}/\sqrt{2}$  и  $(A-B)e^{-i\theta}/\sqrt{2}$ , а амплитуды осцилляторов становятся  $\frac{1}{2}[(A+B)e^{i\theta} \pm (A-B)e^{-i\theta}]$ , т. е.  $A \cos \theta + iB \sin \theta$  и  $B \cos \theta + iA \sin \theta$ . Что касается ансамбля  $A$ -мо-

лекул, то беспорядочность фаз  $B$ -молекул приводит к тому, что средняя амплитуда молекул после соударения составит  $A \cos \theta$ , поскольку  $iB \sin \theta$  при усреднении обратится в нуль. Аналогичным образом соударения сводят  $B$  к  $B \cos \theta$ . По-видимому, равенство  $\theta=1$  является хорошим критерием эффективности соударения. Поскольку  $\theta=t\Delta\omega$ , столкновение должно продолжаться в течение времени  $1/\Delta\omega$ , что совпадает с результатом, полученным на дефазировки полного момента идентичных молекул. Детали использованной модели, по всей видимости, несущественны.

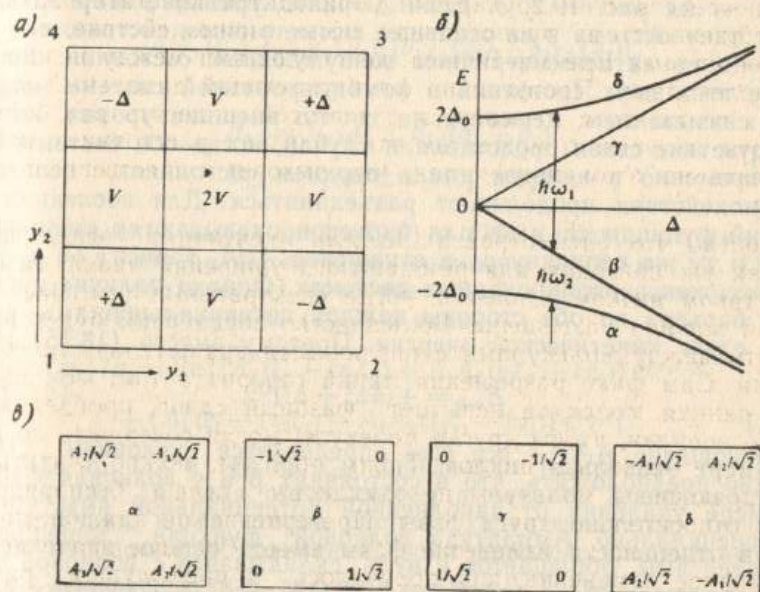


Рис. 19.2. Потенциальная энергия (а) для системы двух двойных потенциальных ям, связанных дипольным взаимодействием с энергией  $\Delta$ . Волновая функция характеризуется амплитудой  $\psi$  для потенциальных ям в четырех углах рисунка; б — изменение энергии уровней как функция  $\Delta$ ; в — амплитуды волновой функции  $\psi$  в четырех потенциальных ямах (см. а) для четырех стационарных состояний, соответствующих обозначениям б

Теперь рассмотрим ту же проблему с точки зрения двух двухуровневых систем, количественно подходящих для описания лучше, чем классические осцилляторы. Столкновение смоделируем остановкой обеих систем друг около друга, чтобы на известное время дать возможность включить взаимодействие между ними.

Если координаты обеих систем обозначить через  $y_1$  и  $y_2$ , то ситуацию можно представить себе (рис. 19.2, а) как движение частицы в потенциальном поле, образованном четырьмя квадратными ямами, отделенными друг от друга вдоль границ слабопроницаемыми барьерами, такими же, как в случае изолированной



двойной ямы с непроницаемой центральной областью, для которой барьер в два раза выше. В том случае, когда системы изолированы, ямы берутся одинаковыми; однако если они взаимодействуют, то предпочтительнее заполняются ямы, расположенные друг против друга, а не соседние. Можно считать, что каждая система, когда она поляризована, создает поле, нарушающее одинаковость ям другой системы. Это выражено потенциалами  $+\Delta$  для ям 1 и 3 и  $-\Delta$  для ям 2 и 4. Уровни энергии показаны на рис. 19.2, б, а соответствующие амплитуды во всех четырех ямах — на рис. 19.2, в. Если  $\Delta=0$ , то уровни  $\beta$  и  $\gamma$  представляют одну систему в ее основном симметричном состоянии, а другую — в ее антисимметричном возбужденном состоянии. Вырождение этих двух состояний в комбинированной системе устраняется связыванием, несмотря на то что внешние уровни, которые в отсутствие связи представляли случай, когда обе системы были одновременно в нижнем или в верхнем состояниях, вследствие взаимодействия продолжают разъединяться. Для последних состояний функции  $\text{ch}$  и  $\text{sh}$  для барьеров оказываются смещены на одну и ту же величину  $y_0$ , а отношение  $A_1/A_2$  зависит от  $y_0$  точно так же, как в изолированных системах. Однако наличие туннельного барьера по обе стороны каждой потенциальной ямы удваивает сдвиг кинетической энергии. Поэтому вместо (18.15) имеем

$$E_{\alpha,\delta} = \pm(4\Delta_0^2 + \Delta^2)^{1/2}, \quad (19.5)$$

но отношение  $A_1^2/A_2^2$  все еще определяется условием (18.17). Можно предположить, что в состояниях  $\beta$  и  $\gamma$  волновая функция по мере удаления от заполненной потенциальной ямы убывает экспоненциально. Амплитуда волновой функции, дошедшей до соседней ямы, обращается в нуль, складываясь с волновой функцией, пришедшей из противоположного угла. А поскольку волновая функция очень близка к экспоненте, поправка к кинетической энергии не требуется. Поэтому энергия уровней составит  $\pm\Delta$ , как показано на диаграмме (рис. 19.2, а).

Предположим, что в момент связывания  $\Psi(y_1, y_2)$  представляет собой суперпозицию данных четырех состояний с амплитудами  $\alpha, \beta, \gamma$  и  $\delta$ . Тогда амплитуды волновых функций для данных четырех ям (нумерация соответствует рисунку) будут следующие:

$$\begin{aligned} B_{1,3} &= (\alpha A_1 \pm \gamma + \delta A_2)/\sqrt{2}, \\ B_{2,4} &= (\alpha A_2 \pm \beta - \delta A_1)/\sqrt{2}. \end{aligned} \quad (19.6)$$

Здесь верхний знак относится к  $B_1$  и  $B_2$ . По истечении времени  $t$  каждый коэффициент нужно умножить на соответствующий ему фазовый множитель  $e^{-iE_\alpha t/\hbar}$  и т. д. Вероятность нахождения частицы первой системы в своей левой потенциальной яме совпадает

с вероятностью того, что любая из ям, 1 или 4, занята. Если дипольный момент этой системы обозначить через  $p_1$ , то

$$\begin{aligned} \langle p_1 \rangle / p_0 &= B_2 B_2^* + B_3 B_3^* - B_1 B_1^* - B_4 B_4^* = \\ &= A_2 (\alpha \beta^* - \gamma \delta^*) e^{i\omega_1 t} - A_1 (\beta \delta^* + \alpha \gamma^*) e^{i\omega_1 t} + \text{к. с.} \end{aligned} \quad (19.7)$$

Здесь  $\hbar\omega_1 = E_\gamma - E_\alpha = E_\delta - E_\beta$  и  $\hbar\omega_2 = E_\beta - E_\alpha = E_\delta - E_\gamma$ .

Этот результат является общим. Конкретизируем его для данного случая, предположив, что в момент связывания  $\Psi$  можно записать в виде произведения:

$$[a_1 \chi_1(y_1) + a_2 \chi_2(y_1)][b_1 \chi_1(y_2) + b_2 \chi_2(y_2)],$$

так что

$$\begin{aligned} B_{1,3} &= 1/2 (a_1 \mp a_2) (b_1 \mp b_2), \\ B_{2,4} &= 1/2 (a_1 \pm a_2) (b_1 \mp b_2). \end{aligned} \quad (19.8)$$

Из сопоставления выражений (19.6) и (19.8) видно, что амплитуды  $\alpha$  и т. д. определяются через величины  $a_1, b_1$  и т. д. После некоторых алгебраических преобразований и использования соотношения (18.12) получаем (19.7) в виде

$$\begin{aligned} \langle p_1 \rangle / p_0 &= \text{Re} \{ [A_2^2 (\xi_1 + i\eta_2 \zeta_1) + A_1 A_2 (\xi_2 \zeta_1 + i\eta_1)] e^{i\omega_1 t} + \\ &+ [A_1^2 (\xi_1 - i\eta_2 \zeta_1) - A_1 A_2 (\xi_2 \zeta_1 - i\eta_1)] e^{i\omega_1 t} \}. \end{aligned} \quad (19.9)$$

Здесь  $(\xi_1, \eta_1, \zeta_1)$  и  $(\xi_2, \eta_2, \zeta_2)$  определяют положение типичных точек на рис. 18.1 для обеих систем в начале взаимодействия. В тех случаях, когда вторая система характеризуется беспорядочным набором фаз колебаний своих диполей, средний эффект для  $\langle p_1 \rangle$  можно получить, положив  $\bar{\xi}_2 = \bar{\eta}_2 = 0$ . Тогда

$$\langle p_1 \rangle / p_0 = \text{Re} [(A_2^2 \xi_1 + i A_1 A_2 \eta_1) e^{i\omega_1 t} + (A_1^2 \xi_1 + i A_1 A_2 \eta_1) e^{i\omega_1 t}]. \quad (19.10)$$

Если взаимодействие является слабым, то  $A_1$  и  $A_2$  мало отличаются от  $1/\sqrt{2}$  и основной эффект соответствует биениям двух слагаемых в соотношении (19.10) с частотами  $(2\Delta_0 \pm \Delta)/\hbar$  в первом порядке по  $\Delta$ .

Тогда

$$\langle \bar{p}_1 \rangle / p_0 \approx \text{Re} [p_1 e^{2i\Delta_0 t/\hbar}] \cos(t\Delta/\hbar). \quad (19.11)$$

Это соотношение указывает на ту же форму поведения, как для двух классических осцилляторов. Амплитуда осциллирующего диполя изменена множителем  $\cos(\Delta\omega t)$ , в котором в данном случае  $\Delta\omega = \Delta/\hbar$ . Результаты оказываются идентичными, так как для двух осцилляторов, находящихся рядом,  $\Delta\omega = fe^2/(8\pi\epsilon_0 m r^3 \omega_0)$ , и



если  $f$  положить равной  $4m\Delta_0\rho_0^2/(\hbar^2e^2)$ , как для двухуровневой системы, то  $\Delta\omega=\rho_0^2/(4\pi\epsilon\hbar r^3)$ , что составляет  $\Delta/\hbar$  для двух двойных потенциальных ям той же формы. Таким образом, мы приходим к заключению, что в случае слабых взаимодействий удовлетворительной моделью нашей системы может служить эквивалентный классический осциллятор.

Этот результат не верен для случая сильных взаимодействий, и не удивительно, потому что эквивалентный осциллятор, как мы уже видели, не описывает сильных возмущений двухуровневой системы. Экстремально сильное взаимодействие возникает тогда, когда взаимная поляризация приводит  $\Delta$  к значениям много большим, чем  $\Delta_0$ , вследствие чего  $A_1\sim 1$ , а  $A_2\sim 0$ . Тогда  $\omega_1\sim 2\Delta/\hbar$  и соотношение (19.10) сводится к выражению

$$\langle \bar{p}_1 \rangle / p_0 = \xi_1 \cos(2t\Delta/\hbar). \quad (19.12)$$

Поскольку  $\Delta \gg \Delta_0$ , возмущение, чтобы быть эффективным, должно действовать только в течение части периода. За меру времени взаимодействия можно принять величину  $\hbar/(2\Delta)$ . Она отличается только коэффициентом 2 от критерия, действующего при слабом взаимодействии.

К уширению линий аммиака в микроволновой части спектра хорошо подходит результат, выраженный соотношением (19.12) для сильных взаимодействий. Забудем на время о вращении молекул и применим те же аппроксимации, что и раньше, для оценки критического расстояния сближения. Так как  $\Delta=\rho_0^2/(4\pi\epsilon_0 r^3)$ , а продолжительность соударения составляет  $r/v$ , то  $r$  должно принимать значение  $[\rho_0^2/(2\pi\epsilon_0\hbar v)]^{1/2}$ , чтобы  $2t\Delta/\hbar$  было равно единице. Тогда площадь мишени окажется равной  $\rho_0^2(2\epsilon_0\hbar v)$ , и если на каждый кубический метр приходится  $n$  молекул, то число соударений в единицу времени будет составлять  $\rho_0^2 n/(2\epsilon_0\hbar)$ , т. е.  $1,3 \cdot 10^{-14} n$ . Полученный результат можно сравнить с экспериментальными данными (см. рис. 18.8, в) для случая, когда  $K=J$ . Он хорошо аппроксимируется моделью вращающихся молекул. Ширина линий пропорциональна давлению и при давлении 0,5 Торр составляет  $1,5 \cdot 10^7$  Гц, что соответствует числу соударений в единицу времени, равному  $4,7 \cdot 10^7$  с $^{-1}$ . При этом давлении  $n$  составляет примерно  $1,7 \cdot 10^{24}$  м $^{-3}$ . Таким образом, из экспериментальных данных получаем, что число соударений в единицу времени равно  $2,8 \cdot 10^{-14} n$ . Как и в случае оценки уширения оптической линии натрия, теоретическая оценка хотя и занижена, но отличается не более чем вдвое. Это, безусловно, не выходит за пределы погрешности проведенной оценки.

Поскольку не учитывалось вращение молекул, можно думать, что реальное расхождение даже больше, чем предполагалось, и отличается от числа 2. Для квантовых чисел  $J$  и  $K$  полный угловой момент равен  $\hbar[J(j+1)]^{1/2}$ , а его компонента  $\hbar K$  направлена вдоль оси, как показано на рис. 19.1. Скорость вращения гораз-

до больше инверсии частоты. Поэтому только часть дипольного момента  $K/(J^2+J)^{1/2}$ , направленная вдоль оси, играет заметную роль в связывании двух молекул. Вследствие этого среднее значение силы постоянного диполя для молекул, соударяющихся с данной молекулой, возможно, меньше 2, а ожидаемое уширение линии тоже соответственно меньше. Те же самые рассуждения приводят к заключению, что молекулы, для которых  $K$  равно или почти равно  $J$ , должны быть особенно чувствительны к соударениям, а те, для которых  $K$  мало, — менее чувствительны. Приведенные здесь простые рассуждения в действительности означают, что ширина линий должна быть пропорциональна  $K/(J^2+J)^{1/2}$ .

Результаты измерений Влинея и Пенроза, отмеченные точками на рис. 19.3, свидетельствуют о сильной взаимосвязи ширины линии с  $K/(J^2+J)^{1/2}$ . Отметим, однако, ради справедливости, что они на основании оценочной теории [4] ожидали, что изменение ширины будет проходить в соответствии с выражением  $[K/(J^2+J)^{1/2}]^{2/3}$ , и обнаружили в своих результатах вполне удовлетворительное подтверждение этого.

То, что прямая не проходит через начало координат, не обязательно опровергает предложенную интерпретацию. Это может означать только то, что между двумя молекулами аммиака существуют локальные взаимодействия даже в том случае, когда одна из них не имеет устойчивой компоненты. Подтверждением этому служит тот факт, что молекулы некоторых неполярных газов могут вызывать значительное уширение спектральных линий аммиака.

Поэтому давайте признаем, что процессы, связанные с уширением линий, хорошо поддаются объяснению с помощью простых моделей, даже простых классических моделей. Однако дальнейшее развитие теории является не простым делом. Вот почему оставим вопрос о причинах, вызывающих уширение линий, и перейдем к практической задаче, как обойти возникающие трудности.

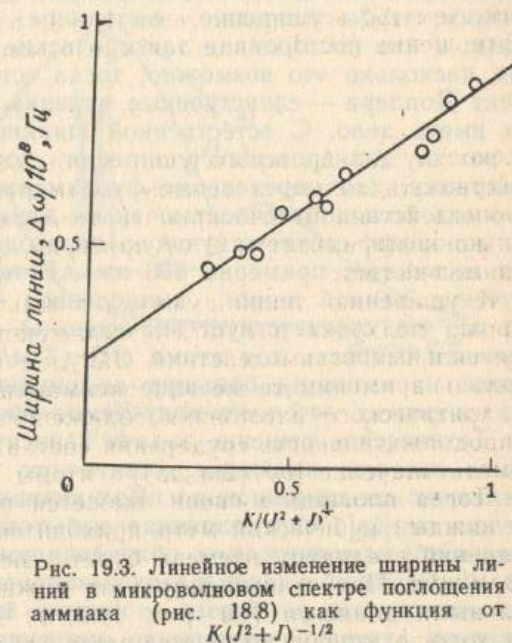


Рис. 19.3. Линейное изменение ширины линий в микроволновом спектре поглощения аммиака (рис. 18.8) как функция от  $K/(J^2+J)^{-1/2}$



### 19.3. ДОПЛЕРОВСКОЕ УШИРЕНИЕ. СПЕКТРОСКОПИЯ НАСЫЩЕНИЯ

Нет необходимости еще что-нибудь говорить о природе доплеровского уширения. Что здесь интересно, так это та остроумная техника спектроскопии насыщения, с помощью которой можно легко выделить многие стороны этого явления и свести ширину спектральных линий к естественной ширине с соответствующим улучшением точности измерения длин волн. В подобных измерениях, претендующих на максимальную точность, должно быть гарантированным, что давление газа поддерживается достаточно низким, чтобы уширение, вызванное соударениями, не играло роли, и что посторонние электрические и магнитные поля удалены, насколько это возможно; тогда естественное уширение и эффект Доплера — единственные явления, с которыми здесь остается иметь дело. С естественной шириной ничего сделать нельзя, а вот от доплеровского уширения хорошо бы избавиться. Так, например, для определения фундаментальных постоянных нужно с очень большой точностью знать длину волны линий атомарного водорода, соответствующую переходу  $2P_{1/2} - 3D_{3/2}$  (длина волны составляет примерно 656 нм). Естественное время жизни излучения данной линии, вычисленное теоретически, составляет 16 нс, что соответствует значению  $Q$ , равному  $4,5 \cdot 10^7$ , так что лучевая скорость для атома  $c/Q$  (7 м/с) привела бы к сдвигу линии на величину, большую ее ширины. При типичных для атома скоростях  $\sim 2$  км/с получаемое преимущество очевидно.

Техническое решение задачи зависит от наличия перестраиваемых лазеров, имеющих достаточную мощность, чтобы вызвать заметное насыщение линии. Как показывает соотношение (18.56), величина  $|\xi_0|$ , определяющая избыток невозбужденных атомов над возбужденными, при облучении уменьшается, и значительно, если частота облучения равна резонансной частоте перехода. Когда частота лазера близка к частоте перехода атомов, имеющих нужную лучевую скорость, то они окажутся в резонансе с излучением, претерпевшим доплеровское смещение, что приведет к их сильному возбуждению. Кроме того, при интенсивном облучении  $\xi_0$  можно уменьшить практически до нуля и населенности возбужденных и невозбужденных уровней атомов выравниваются. Атомы, движущиеся с другими лучевыми скоростями, такого воздействия не испытывают.

Другой, более слабый световой поток той же частоты, но введенный в резонатор в противоположном направлении, в свою очередь, окажется наиболее сильно поглощенным теми атомами, которые имеют противоположную скорость. Если затем лазер незначительно расстроить, то атомы, наиболее сильно взаимодействующие с первым лучом, не будут поглощать излучение второго потока и коэффициент поглощения для второго луча изменится мало.

С другой стороны, если лазер настроен идеально, то поглощение атомов, находящихся в состоянии покоя или движущихся в плоскости, нормальной к свету, окажется насыщенным первым световым потоком. Это как раз те самые атомы, которые поглотили бы второй луч, если бы не оказались в состоянии насыщения. Таким образом, выгорание линии поглощения сигнализирует о выполнении условия точной настройки.

На рис. 19.4 кривая *a* иллюстрирует распределение атомов по лучевым скоростям  $f(v) \sim e^{-mv^2/(2k_B T)}$ . При облучении свет, частота которого превышает резонансную частоту на  $\Delta\omega$ , поглоща-

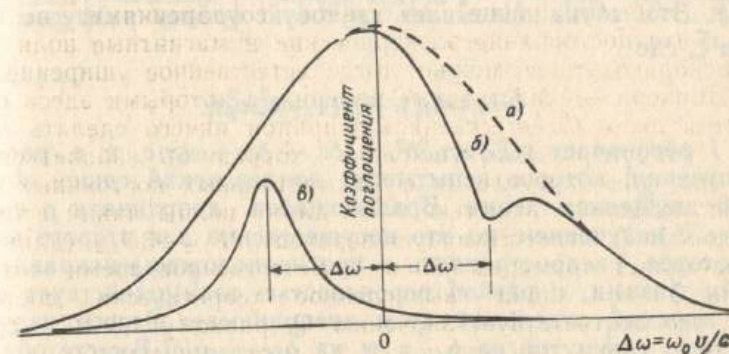


Рис. 19.4. Иллюстрация принципа спектроскопии насыщения. (Подробности в тексте.)

ется только атомами, удаляющимися от источника со скоростью, близкой к  $c\Delta\omega/\omega_0$ . Кривая *a* представляет собой также зависимость коэффициента поглощения газа от частоты при небольшой мощности лазера, если по оси абсцисс вместо  $v$  взять  $\Delta\omega$  в масштабе  $\omega_0/c$ . При большей мощности излучения поглощение атомов, движущихся со скоростями, диапазон которых примерно соответствует естественной ширине линии, насыщается и коэффициент поглощения уменьшается, как показано на кривой *б* для  $\Delta\omega > 0$ . Слабое излучение того же лазера, распространяющееся в противоположном направлении, будет поглощаться атомами, также движущимися со скоростью  $c\Delta\omega/\omega_0$ , но в противоположном направлении. Так как атомы, не попадающие точно в резонанс, но укладывающиеся в естественную ширину линии, могут поглощать соответственно формуле Лоренца, полное поглощение слабого излучения можно получить, умножая ординаты кривой *б* на лоренциан с центром в  $-\Delta\omega$  и определяя площадь под кривой, выражающей произведение. Его изменение как функция от  $\Delta\omega$  соответствует обычной форме кривой доплеровского уширения, за исключением того случая, когда  $\Delta\omega$  столь мало, что впадина на кривой *б* и горб на кривой *в* перекрываются. Именно эта узкая



впадина и определяет измеряемую форму линии. Доплеровская ширина, будучи гораздо большей, фактически не имеет значения. Ее нужно учитывать лишь как малую поправку в анализе результатов.

Чтобы количественно развить теорию, будем считать кривую  $\rho$  на всем протяжении плоской, за исключением впадины, вызванной облучением.

Для оптического эксперимента, проводимого при комнатной температуре,  $\xi_0$  положим равной  $-1$ , т. е. учтем только спонтанную эмиссию вещества, тогда типичная точка для типичного облучаемого атома имеет координаты  $\rho$  и  $\xi$ , как следует из (18.55) и (18.56). Эта точка описывает круговую орбиту радиусом  $\rho_0$  на уровне  $\xi$ , где

$$\xi = -1/[1 + I/(1 + \delta_+^2 \tau_p^2)]. \quad (19.13)$$

Здесь  $I$  обозначает  $\rho_0 E_0^2 \tau_p / \hbar^2$ , а  $\delta_+ = \Delta\omega + \omega_0 v/c$ , т. е. расстройку излучения, которое испытывает доплеровский сдвиг, обусловленный движением атома. Вращающаяся координата  $\rho$  связана по фазе с излучением, но это несущественно для второго излучения, которое, распространяясь в противоположном направлении с любыми фазами, с равной вероятностью взаимодействует с атомами. Каждый отдельный атом воспринимает второе излучение на частоте, сдвинутой на  $\delta_-$ , т. е. на  $\Delta\omega - \omega_0 v/c$ . Вместе оба луча образуют осциллирующее поле, слабо промодулированное на частоте биений  $2\omega_0 v/c$ . Если интенсивность обоих излучений велика, модуляция вызывает периодические изменения  $\rho$  и приводит к нелинейному смещению. Однако если второй луч является слабым, то  $\xi$  с точностью до первого порядка можно считать константой, численно равной соотношению (19.13), определяемому первым излучением. Отклик на воздействие второго излучения можно найти, используя (18.55):

$$\rho_0 = -iCE_2/\{[1 + I/(1 + \delta_+^2 \tau_p^2)][1 + i\delta_- \tau_p]\}. \quad (19.14)$$

Здесь  $C = \rho_0 \tau_0 / \hbar$ , а  $E_2$  — напряженность электрического поля второго излучения. Потери излучения, приходящиеся на один атом, определяются величиной  $\text{Im}[\rho_0/E_2]$ . Нам же нужно найти полный вклад, вносимый атомами, движущимися с различными скоростями.

Максимальное значение величины  $\text{Im}[\rho_0/E_2]$ , равное  $C$ , достигается при идеальной настройке лазера, низкой интенсивности и  $v=0$ . В этом случае  $\delta_+ = \delta_-$  и  $I \ll 1$ . Если ввести функцию  $W$ , определяемую выражением

$$W(\Delta\omega) = -\frac{1}{C} \int_{-\infty}^{\infty} \text{Im}[\rho_0/E_2] dv,$$

то она имеет смысл меры затухания второго излучения при расстройке  $\Delta\omega$ . Мы используем ее как эквивалент полосы пропускания скоростей: затухание оказывается таким же, как если бы все атомы в пределах  $\pm W$  имели максимальный коэффициент поглощения, а остальные атомы — не поглощали вовсе. Из (19.14) имеем

$$W(\Delta\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dv (1 + \delta_+^2 \tau_p^2) / (1 + \delta_+^2 \tau_p^2 / \alpha^2) (1 + \delta_-^2 \tau_p^2) = \\ = \frac{\pi c}{\omega_0 \tau_p} \left\{ 1 - \frac{\alpha^2 - 1}{\pi \alpha^2} \int_{-\infty}^{\infty} [1 + (x_0 + x)^2 / \alpha^2]^{-1} [1 + (x_0 - x)^2]^{-1} dx \right\}.$$

где  $\alpha^2 = 1 + I$ ;

$$x = \omega_0 \tau_p v/c \text{ и } x_0 = \tau_p \Delta\omega.$$

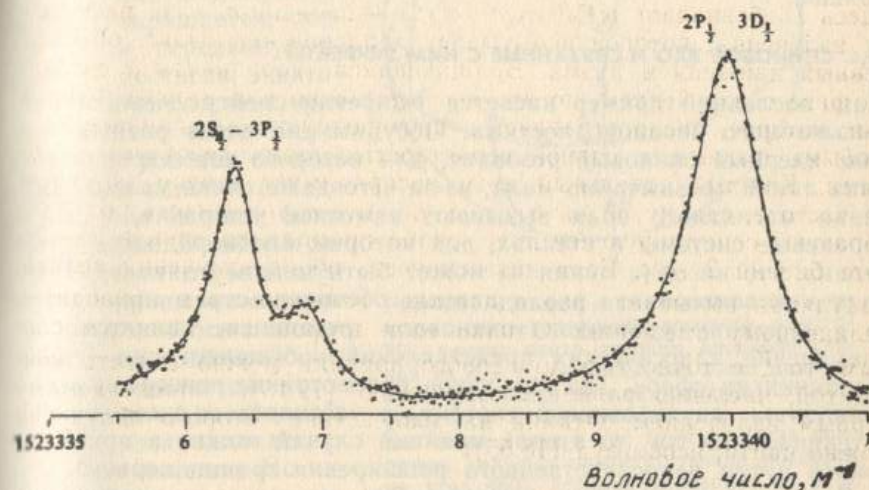


Рис. 19.5. Тонкая структура спектра поглощения водорода, выявленная при применении спектроскопии насыщения (Петли и Моррис [6]). Сплошная кривая — теоретическая с подобранными так параметрами, чтобы получить наилучшее соответствие с экспериментом. С помощью этих параметров волновое число каждой компоненты может быть определено с точностью до  $10^{-14}$  м. Разделение главных пиков (сдвиг Лэмба) составляет около  $2.4 \cdot 10^{-12}$  м, что на  $1/10$  меньше доплеровской ширины каждой линии

Интеграл легко оценить, выбрав в качестве контура обхода в прямом направлении действительную ось, а в обратном — полуокружность бесконечного радиуса. Тогда

$$W(\Delta\omega) = \frac{\pi c}{\omega_0 \tau_p} \{1 - (1 - 1/\alpha)/(1 + \Delta\omega^2 \tau_1^2)\}. \quad (19.15)$$

Здесь  $\tau_1 = 2\tau_p/(1 + \alpha)$ .



При малых интенсивностях первого луча  $(1 - 1/\alpha) \ll 1$  выгорание линии поглощения невелико; ширина линии равна естественной ширине, определяемой  $\tau_p$ . По мере увеличения  $I$  выгорание становится заметнее, но лишь при некоторых значениях, определяющих ширину линий. Физическая причина очевидна: более сильное излучение действует на  $\xi$  в более широком диапазоне частот или скоростей, а действительно очень сильное излучение может насытить переходы во всем диапазоне заданной ширины.

Экспериментальные возможности технологии хорошо проиллюстрированы на рис. 19.5, где показано разрешение трех компонентов тонкой структуры спектра водорода, которые оказались бы затерянными в доплеровском уширении [6]. Отношение частот двух основных компонент, отделенных друг от друга лэмбовским сдвигом, составляет 2 к  $10^6$ . Доплеровская ширина линии атомного водорода при комнатной температуре примерно в десять раз больше.

#### 19.4. СПИНОВОЕ ЭХО И СВЯЗАННЫЕ С НИМ ЭФФЕКТЫ

Наш последний пример касается уширения спектральных линий, вызываемого неоднородностями. Обсудим два очень разных случая: ядерный спиновый резонанс, для которого естественная ширина линий чрезвычайно мала, из-за чего даже очень малые изменения магнитного поля вызывают заметное уширение, и двухуровневые системы в стеклах, для которых неоднородность столь велика, что ни одна линия не может быть толком выявлена. Природа и использование эха в данных обстоятельствах обсуждаются в терминах протонного спинового резонанса, допускающих применение классических представлений об ориентации спина как точки на сфере. Так как такое рассмотрение непосредственно приводит к двухуровневой системе, в частности к системе двух потенциальных ям, то второй крайний случай можно в принципе понять путем непосредственного расширения границ первого.

Займемся ансамблями, находящимися в тепловом равновесии, каждый член которых представляется точкой на сфере с центром инерции в некоторой точке  $\xi_0$  на вертикальной оси. Если диссипации нет, то, пока системы идентичны, они откликаются на внешнее воздействие так, что их центр инерции остается на сфере радиуса  $|\xi_0|$ . Удобно заменить единичные сферы на рис. 18.1 и 18.4 этой меньшей сферой, тогда нижний полюс будет представлять собой ту точку, к которой стремится центр инерции в результате диссипативных процессов.

Как и прежде, постоянная времени  $T_1$  для релаксации в направлении  $\xi$  в общем случае не совпадает с постоянной времени  $T_2$  для релаксации в плоскости  $\xi$ — $\eta$ . Центр инерции дает всю информацию, необходимую для результатов измерений магнитного момента строго однородного ансамбля спинов. Однако если магнитное поле меняется от точки к точке в образце, то спины пре-

цессируют с различными скоростями и теперь требуется целое облако точек, каждая из которых представляет центр инерции спинов в настолько малой области, что ее можно считать однородной.

Рассмотрим воздействие неоднородности на результаты типичного эксперимента

по измерению ядерной индукции [7] (см. § 8.5). Вначале все точки лежат у нижнего полюса, но облучение на резонансной частоте заставляет их вращаться вокруг некоторой горизонтальной оси, которую мы примем за ось  $\xi$ . В идеальном случае облучение прекращается, тогда точки передвинулись на  $90^\circ$  и достигли экватора. В системе отсчета, вращающейся с частотой резонанса, все они оставались бы в одной и той же точке, если бы поле было однородным. В лабораторной системе отсчета возникает вращение вокруг вертикальной оси и возникает сигнал ядерной индукции, амплитуда которого остается постоянной, пока не возникают диссипативные явления. Но неоднородность стационарного поля вызывает вращение различных точек с различными скоростями.

В системе отсчета, спинарующей на средней скорости, они движутся веерообразно вперед и назад вдоль экватора, вынуждая центр инерции перемещаться к оси. Поэтому в отсутствие диссипации сигнал уменьшается до тех пор, пока точки не распределятся равномерно вокруг экватора. Тогда сигнал исчезает полностью. Однако его можно восстановить вновь на время, в два раза большее, чем в первый раз, облучая образец, что приведет к продвижению каждой точки на  $180^\circ$  около оси  $\xi$ . Через время, равное интервалу между первыми двумя облучениями, веер вновь сомкнется и индукционный сигнал восстановится, но только для того, чтобы снова затухнуть в ходе веерообразного

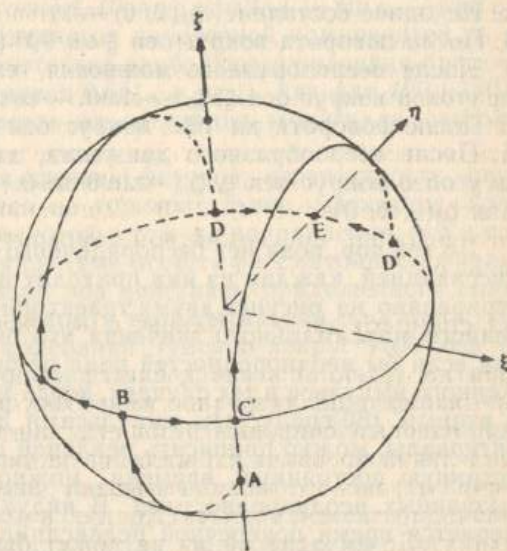


Рис. 19.6. Иллюстрация спинового эха: импульс, соответствующий повороту на угол  $90^\circ$ , уводит центр инерции ансамбля спинов из  $A$  в  $B$ , где типичные точки движутся веерообразно в экваториальной плоскости;  $C$  и  $C'$  показывают, где находятся две такие точки в тот момент, когда приложен импульс, соответствующий повороту на угол  $180^\circ$ , который переводит их в  $D$  и  $D'$ . Через некоторое время все точки мгновенно попадут в  $E$ . Заметим, что здесь оси повернуты на угол  $90^\circ$  по сравнению с рис. 19.7 и 18.1



процесса. Восстановленный сигнал представляет собой спино-вое эхо.

На рис. 19.6 показаны его последовательные стадии. Процесс можно также представить в декартовых координатах, введя угол  $\theta$ , характеризующий веерообразное движение некоторой типичной точки, участвующей в различных вращениях, а именно:

- А. Исходное состояние:  $\zeta_0(0, 0, -1)$ .
- Б. После поворота вокруг оси  $\xi$  на  $90^\circ$   $\zeta_0(0, -1, 0)$ .
- В. После веерообразного движения, характеризуемого поворотом на угол  $\theta$  вокруг оси  $\zeta$ ,  $\zeta_0(-\sin \theta, -\cos \theta, 0)$ .
- Г. После поворота на  $180^\circ$  вокруг оси  $\xi$   $\zeta_0(-\sin \theta, \cos \theta, 0)$ .
- Д. После веерообразного движения, характеризуемого поворотом на угол  $\theta$  вокруг оси  $\zeta$ ,  $\zeta_0(-\sin \theta \cos \theta + \cos \theta \sin \theta, \cos^2 \theta + \sin^2 \theta, 0)$ , т. е.  $\zeta_0(0, 1, 0)$ .

До тех пор, пока нет беспорядочного разброса точек, вызванного диссипацией, каждая из них приходит в точку  $E$ , как это проиллюстрировано на рисунке двумя траекториями. В момент своего мгновенного максимального значения эхо оказывается таким сильным, как если бы неоднородностей поля не было вовсе. Спад силы отраженного импульса в тех случаях, когда между первым 90-градусным и вторым 180-градусным импульсами допускаются более длинные интервалы, можно приписать реальной диссипации. Таким образом, истинную постоянную времени можно отделить от артефактов, вызванных неоднородностями. В индукционном эксперименте измеряется время поперечной релаксации, поэтому  $T_2$  характеризует скорость затухания отраженного эхосигнала.

Два момента стоит прокомментировать дополнительно к этому кратко изложению. Во-первых, в техническом отношении легче использовать идентичные импульсы, чем получить второй импульс с продолжительностью, в два раза большей, чем первый. Проследим судьбу типичной точки при ее повороте под действием каждого импульса на угол  $\varepsilon$  вокруг  $\xi$ :

- А. Исходное состояние:  $\zeta_0(0, 0, -1)$ .
- Б. После первого импульса  $\zeta_0(0, -\sin \varepsilon, -\cos \varepsilon)$ .
- В. После веерообразного движения на угол  $\theta$   $\zeta_0(-\sin \varepsilon \sin \theta, -\sin \varepsilon \cos \theta, -\cos \varepsilon)$ .
- Г. После второго импульса  $\zeta_0(-\sin \varepsilon \sin \theta, -\sin \varepsilon \cos \theta \cos \varepsilon - \cos \varepsilon \sin \varepsilon, -\cos^2 \varepsilon + \sin^2 \varepsilon \cos \theta)$ .
- Д. После веерообразного движения на угол  $\theta$

$$\zeta_0(-\sin \varepsilon \sin \theta \cos \theta - \cos \varepsilon \sin \varepsilon \sin \theta (1 + \cos \theta),$$

$$-\cos \varepsilon \sin \varepsilon (\cos^2 \theta + \cos \theta) + \sin \varepsilon \sin^2 \theta, -\cos^2 \varepsilon + \sin^2 \varepsilon \cos \theta).$$

Теперь нет и речи о том, чтобы все точки заканчивали движение в одном и том же месте: некоторые сигналы неизбежно оказываются потерянными. Однако, если  $\varepsilon$  выбрано удачно, потери не слишком велики.

Рассмотрим обычную ситуацию, в которой неоднородность вызывает потерю сигнала за время, много меньшее  $T_1$  или  $T_2$ . Тогда после первого импульса точки рассеиваются по всей сфере прежде, чем второй импульс их снова соберет вместе. Если все значения  $\theta$  одинаковы, то окончательное положение центра инерции получают усреднением по  $\theta$ , положив  $\cos \theta = \sin \theta = 0$ , а  $\cos^2 \theta = \sin^2 \theta = 1/2$ , так что он оказывается в точке  $\zeta_0(0, -1/4 \sin 2\varepsilon + 1/2 \sin \varepsilon, -\cos^2 \varepsilon)$ . Индукционный сигнал определяется поперечной компонентой, т. е.  $\zeta_0(1/2 \sin \varepsilon - 1/4 \sin 2\varepsilon)$ , и достигает наибольшего значения при  $\varepsilon = 120^\circ$ . Его величина составляет  $0,65\zeta_0$ , а не  $\zeta_0$ , как для  $(90+180)$ -градусных импульсов. Скорость же затухания эхосигнала связана с  $T_2$ .

Второй момент касается степени фазовой когерентности двух импульсов. Спин откликается на горизонтальное магнитное поле вращением с резонансной частотой в том же направлении, что и его прецессия. Во вращающейся системе отсчета рассматривается только эта компонента осцилляций под действием приложенного поля. Она лежит под каким-либо углом в горизонтальной плоскости, которая определяется фазой колебаний. Именно вокруг этой оси (в приведенном выше изложении она была принята за ось  $\xi$ ) и совершается вращение точки под действием облучения. Допущение, что та же ось годится для действия двух импульсов, равносильно предположению, что частота осциллятора остается точно такой же в период между двумя импульсами, которые налагаются как стробы на выход излучения осциллятора в соответствующие моменты времени. В действительности эти тонкости не так уж необходимы. Достаточно включать осциллятор в момент действия каждого импульса в отдельности, не беспокоясь о фазовых соотношениях. Оба поворота на  $\varepsilon$  совершаются вокруг различных горизонтальных осей. Этот эффект наиболее заметен при графическом изображении. На рис. 19.7 исходный процесс показан в перспективе и в горизонтальной проекции с  $\varepsilon = 120^\circ$ . Путь одной системы с  $\theta = 135^\circ$  показан в деталях подобно тому, как это сделано на рис. 19.6. В том случае, когда дается достаточное время, чтобы точки могли совершить много оборотов и равномерно распределиться вдоль горизонтальной окружности, проходящей через точку  $B$ , второй импульс, наклоняющий окружность на угол  $120^\circ$ , возбуждает индуцированный сигнал, так как теперь появляется незатухающий средний поперечный момент. Однако сигнал пропадает, так как все точки совершают веерообразное движение с различными скоростями. Они собираются вместе только в момент, соответствующий отраженному сигналу, который возникает как результат мгновенного «соударения» с кривой, похожей в плане на кардиоиду. Именно она заменяет единственную точку  $E$  на рис. 19.6.

Предположим теперь, что первое вращение совершалось вокруг другой оси, так что точки, первоначально расположенные в  $A$ , оказались сдвинутыми в  $B'$ . Тогда систему, эволюцию которой мы прослеживали от  $B$  до  $C$ , затем до  $D$  и, наконец, до  $E$ , можно по харак-



теру поведения считать равнозначной другой системе, для которой угол поворота при веерообразном движении составляет  $\theta - \varphi$ . Эта система переходит от  $A$  в  $B'$ , а затем в  $C$ , следуя по тому же пути, что и исходная система при переходе в  $D$ . Однако на последнем этапе она не совершает веерообразного движения до точки  $E$ , а лишь до  $E'$ , потому что угол ее поворота меньше на  $\varphi$ . То же самое можно сказать о каждой точке, так что в момент возникновения эхосиг-

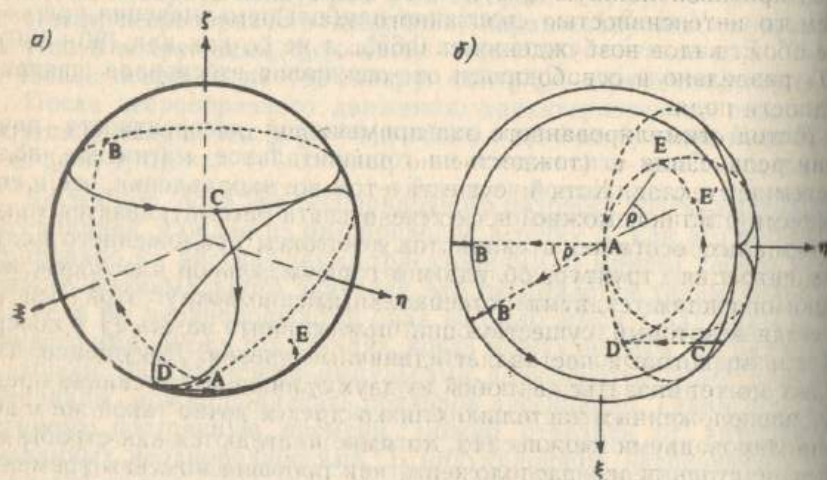


Рис. 19.7. Траектория типичной точки в эксперименте по наблюдению спинного эха с двумя импульсами, соответствующими повороту на угол  $120^\circ$ . а — вид в перспективе, б — горизонтальная проекция. Траектория  $ABCDE$  типична для когерентных импульсов, а  $AB'CDE'$  — для импульсов с относительным сдвигом фазы  $\varphi$

нала все точки лежат на идентичной кардиоиде, но повернутой на угол  $\varphi$ . За время, которое раньше отводилось на полное покрытие точками окружности, кардиоида заполняется точками точно так же для всех  $\varphi$ . Поэтому только фаза, а не амплитуда отраженного сигнала оказывается зависимой от степени когерентности между импульсами.

Эхо, описанное только что с использованием двух импульсов, известно под названием *спонтанного эха* в отличие от *стимулированного эха*, для описания которого нужны три различных импульса. Первый должен иметь энергию и длительность, достаточные, чтобы вызвать поворот всей картины на  $180^\circ$ , в результате которого центр инерции, стартовавший на южном полюсе  $-\zeta_0$ , теперь перейдет на северный полюс  $+\zeta_0$ . Индуцированный сигнал не возникает, поскольку не создается средний вращающийся диполь. Центр инерции релаксирует обратно к  $-\zeta_0$ , имея время продольной релаксации  $T_0$ . В некоторый момент времени, прежде чем этот процесс завершится, как и в случае обычного спонтанного эха, налагаются еще два дополнительных импульса. В результате через интервал времени после

третьего импульса, который отделяет его от второго импульса, возбуждается эхо. Его амплитуда определяется величиной  $\zeta_0'$ , до которой релаксировал центр инерции к началу второго импульса, и задержкой третьего импульса относительно второго. Сохраняя эту задержку постоянной и меняя время между первым и вторым импульсами, можно проследить релаксацию  $\zeta_0'$ . При прохождении  $\zeta_0'$  через центр сферы амплитуда сигнала падает до нуля, а затем он, имея противоположную фазу, вновь возрастает до уровня, определяемого интенсивностью спонтанного эха. Совместное использование обоих видов возбуждения спинного эха позволяет измерить  $T_1$  и  $T_2$  отдельно и освободиться от маскирующего эффекта неоднородности поля.

Метод стимулированного эха применялся для определения времени релаксации  $\tau_c$  (тождественно равно  $T_1$ ) для двухуровневых систем в стеклах. Хотя и существует некоторая неопределенность в форме отклика, можно не сомневаться в том, что в аморфных материалах, особенно в силикатных стеклах, существует высокая концентрация структур, обладающих всеми основными характеристиками систем с двумя потенциальными ямами. Скорее всего имеется некоторый, существующий при обычных условиях атомный механизм, который поставляет единичные протоны, каждый из которых может оказаться в любой из двух одинаковых потенциальных ям, расположенных настолько близко друг к другу, что допускать туннелирование возможно. Но эти ямы не столь высокосимметричны и не столь редко расположены, как протонные системы в полиэтилене. В них могут быть обнаружены все неоднородности потенциальных ям. Таким образом, если бы они даже имели одинаковые  $\Delta_0$ , то разброс  $\Delta$  и, следовательно,  $E$  смазал бы полностью любую резонансную линию, которую можно было бы выявить. Получается, что рассматриваемый ансамбль систем имеет определенное сходство с только что рассмотренной спиновой системой и может быть представлен таким же способом, с тем лишь отличием, что вместо малой неоднородности поля и, следовательно, малого разброса  $E$  мы будем иметь дело с очень большим разбросом  $E$ .

Однако описанный метод позволяет выделить из общего числа те системы, для которых значения  $E$  лежат в узком интервале, и провести измерение их времен релаксации.

Поскольку это относится к вероятности туннелирования и связано со взаимодействием с колебаниями решетки, поступающая информация в принципе совпадает с информацией, которую можно получить при изучении диэлектрических потерь в полиэтилене и сходных с ним материалах, где почти не сказываются размывающие эффекты неоднородностей. В стеклах же гипотетические релаксационные пики Дебая размыты настолько, что практически исчезает зависимость диэлектрических потерь от частоты, а этот случай не представляет для нас большого интереса.

Эксперимент, аналогичный стимулированному эху, был проведен с *фотонным эхом*. Он осуществлялся при очень низких температу-



рах на образцах из силикатного стекла, помещенных в микроволновой резонатор [8]. Используемые для сдвига типичных точек по сфере импульсы электрического поля подавались в резонатор с частотой 720 МГц, на которой возникал резонанс, по крайней мере некоторых двухуровневых систем.

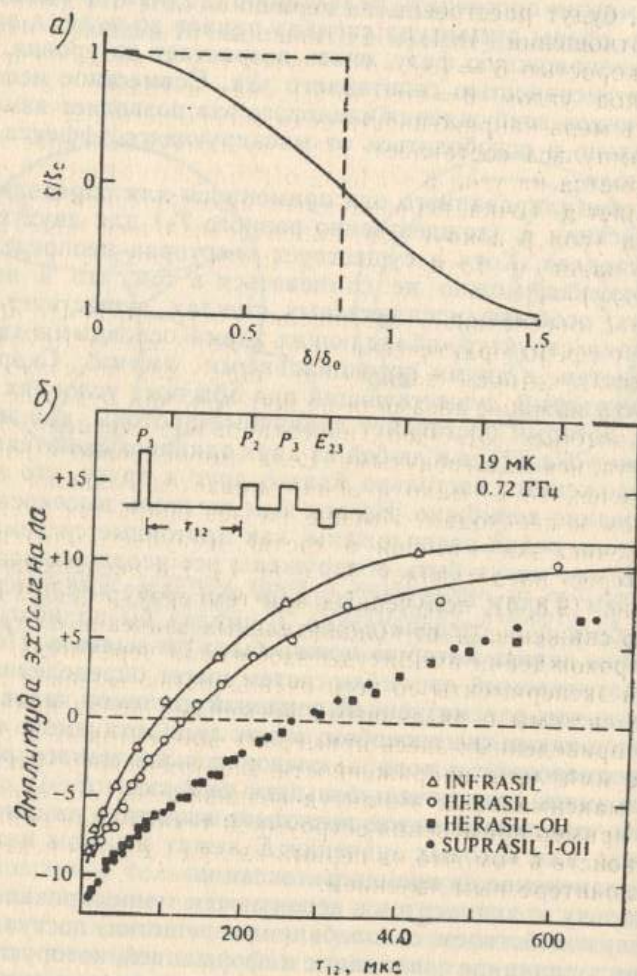


Рис. 19.8. Центр инерции типичных точек, первоначально находившихся в  $-\xi_0$ , импульсом, соответствующим повороту на угол  $180^\circ$ , поднимается в  $\xi_0$  (а); показано, как  $\xi$  зависит от расстройки между частотой системы с двойной потенциальной ямой и частотой импульса; площадь под кривой равна площади прямоугольника с шириной  $0.8$ ; б — способ определения  $T_1$  в эксперименте с фотонным эхом, основанный на изменении амплитуды эхосигнала с временем задержки  $\tau_{12}$  импульса  $180^\circ$  относительно импульса  $90^\circ$  [8]; различные точки относятся к разным сортам силикатного стекла

Предположим, что все системы имеют одинаковые  $\Delta_0$  с обширным разбросом  $\Delta$  и (для удобства) что осциллятор настроен на частоту  $2\Delta_0/\hbar$ . Тогда системы, для которых  $\Delta=0$ , инвертированы первым импульсом, так как их типичные точки повернутся на  $180^\circ$  вокруг горизонтальной оси. Однако те системы, для которых  $\Delta$  не равно нулю, будут расстроены на величину  $\Delta_0/E-1$  [обозначим ее  $\delta$ , как в соотношении (18.4)]. Их типичные точки будут поворачиваться со скоростью  $\delta'=(\delta_0^2+\delta^2)^{1/2}$  вокруг оси, наклоненной к горизонтали под углом  $\theta=\arctg(\delta/\delta_0)$ , как показано на рис. 18.1. Здесь  $\delta_0$  есть мера напряженности осциллирующего поля. Если длительность импульса составляет  $\pi/\delta_0$ , то типичная ненастроенная точка повернется на угол  $\beta=\pi(\delta_0^2+\delta^2)^{1/2}/\delta_0$ , что в идеале при  $\delta=0$  составляет  $\pi$ . Точка, первоначально находившаяся в  $-\xi_0$ , после поворота на угол  $\beta$  вокруг оси, направленной вверх под углом  $\theta$  к оси  $\xi$ , попадет в точку  $\xi_0[-1/2 \sin 2\theta(1-\cos \beta), -\cos \theta \sin \beta, \cos^2 \theta(1-\cos \beta)-1]$ .

Разброс  $E$  обеспечивает совершение веерообразного движения точек вокруг сферы практически мгновенно, и мы займемся только  $\xi$ -компонентой, которая зависит от  $\delta/\delta_0$ , как показано на рис. 19.8, а. Центр инерции ансамбля поднят так, как будто все те системы, для которых  $|\delta|<0.8\delta_0$ , инвертированы идеально, а все остальные остались незатронутыми. Если импульс слаб и достаточно продолжителен, то  $\delta_0$  мало и обнаруживается большая селективность систем к переходам. Именно на нее опирается эксперимент по наблюдению эха — второй и третий импульсы близки друг к другу, интерес представляет  $T_1$ , а не  $T_2$ . На экспериментальных кривых (рис. 19.8, б), полученных при температуре 0,019 К, отчетливо видно снижение  $\xi_0'$  от положительных значений к отрицательным при прохождении амплитуды эхосигнала через нуль. Интересно, что эти эксперименты со всей очевидностью выявили две двухуровневые системы с различными временами релаксации (140 и 410 мкс в приведенных здесь примерах), для которых и требуются различные импульсы напряженности электрического поля для достижения максимальных амплитуд возникающих эхосигналов. Это отличный пример применения остроумной техники для обнаружения важных свойств в том, что на первый взгляд кажется неперспективным и малоинтересным явлением.



Первоначальный вариант мазера Гордона, Цайгера и Таунса [1], использующий сфокусированный поток молекул аммиака, находящихся в антисимметричном состоянии, — это достаточно понятный пример, на который можно опираться при обсуждении принципов, лежащих в основе когерентного возбуждения вибраторов стимулированным излучением. В гл. 18 (см. § 18.9) было показано, как с помощью квадрупольной электростатической линзы осуществляется разделение молекул, находящихся в симметричном и несимметричном состояниях. Будем считать это разделение идеальным. Все рассуждения нетрудно распространить на случай, когда имеется лишь некоторая доля молекул в симметричном состоянии. Кроме того, проигнорируем любые осложнения, возникающие вследствие разнотипности вращательных состояний, приводящих к тонкой структуре спектра, показанного на рис. 18.8.

Предположим, что только одна линия, например сильная линия 3,3 с частотой 23,9 ГГц, существенна. Это допущение основано на том, что если микроволновой объемный резонатор возбуждается молекулами, то, как правило, он должен быть настроен на частоту, очень близкую к собственной частоте этих молекул.

Простейшее интуитивное указание на идею заложено в эйнштейновской трактовке излучения через вероятности стимулированных и спонтанных процессов \* (см. § 16.5, 18.6). Поле стимулирует возбужденные молекулы, проходящие через резонатор, который уже находится в колебательном режиме. Если собственная частота резонатора хорошо подогнана к частоте перехода, то возбужденные молекулы могут перейти в основное состояние. Их энергия на выходе из резонатора окажется на  $2\Delta_0$  меньше энергии на входе. Излученная энергия когерентна по фазе с колебаниями резонатора, амплитуда которых в силу сказанного выше возросла. Каждая молекула, совершающая переход, увеличивает квантовый номер колебаний на единицу. Продолжительность спонтанной релаксации возбужденной молекулы столь значительна по сравнению с длитель-

\* Если мы и ссылаемся здесь на соображения Эйнштейна, то это вовсе не означает, что ему принадлежит иная роль, кроме той, что он ввел в терминологию, принятую в физике, коэффициенты излучения. Эйнштейн не несет ответственности за фундаментальные дефекты теории в ее применении к мазеру.

ностью пребывания в резонаторе, что роль спонтанных процессов невелика и в данный момент ими можно пренебречь. Стенки резонатора обладают обычной способностью к рассеянию излучения, и если мазер используется как микроволновой источник, то отток мощности увеличивает эту естественную способность. Вследствие того что скорость передачи мощности от какой-либо молекулы резонатору пропорциональна плотности энергии в резонаторе, а скорость рассеяния также пропорциональна плотности энергии, существует некоторый критический пороговый поток возбужденных молекул, ниже которого возбуждение оказывается недостаточным для преодоления затухания.

Однако при потоках, превышающих критические, избыток мощности, поставляемой молекулами, вызывает подъем уровня колебаний до тех пор, пока сделанные выше допущения не окажутся нарушенными и резонатор не выйдет на устойчивый режим. Эти процессы выглядят вполне понятными и, как будет показано, легко поддаются математическому описанию. Однако для получения правильных количественных результатов потребуются значительные уточнения.

Более классический подход в значительно меньшей степени можно подвергнуть критике. Поэтому попытаемся развить приведенное в гл. 18 обсуждение функции отклика. Аргументация Эйнштейна позволяет вычислить пороговый поток и дает прекрасное представление об устойчивом состоянии. Простейшее применение принципа неопределенности указывает на необходимость хорошей настройки резонатора: если время пребывания молекулы равно  $T$ , то едва ли до ухода молекулы окажется замеченной погрешность по частоте, меньшая  $1/T$ . Приближение с помощью функции отклика, дающее все необходимое для аргументации Эйнштейна и одновременно явно показывающее, насколько по мере расстройки возрастает поток, позволяет получить числовые значения для частотного диапазона, в пределах которого мазер будет действовать для данного потока.

Более того, данный подход показывает, что, когда система расстроена, частота устойчивых колебаний является компромиссной между частотами резонатора и молекулы при сильном превалировании последней. Однако подход не позволяет обнаружить существования источника шума. Чисто квантовая трактовка указывает на его существование. Причем этот шум не всегда сопутствует диссипативному процессу (шум Джонсона). В равной мере он неотделим от возбуждения.

Наличие шума является главной причиной беспорядочного дрейфа фазы колебаний, что ограничивает когерентность излучения. На практике для мазера, работающего в микроволновом диапазоне частот, квантовый шум гораздо менее существен, чем шум тепловой. Однако его выявление методами квантовой механики приносит такое интеллектуальное удовлетворение, что имеет смысл развить этот вопрос.



Отныне и впредь примем упрощенную модель резонатора: повсюду вдоль линии следования молекулы не только фаза, но и амплитуда колебаний электрического поля постоянны, а не меняются по синусоидальному закону в зависимости от положения, как это бывает для пучностей стоячей волны. Если при достижении полем максимального значения  $E_0$  энергия резонатора составляет  $E$ , то вместо  $E$  можно записывать  $\frac{1}{2}\epsilon_0 E_0^2 V_{\text{эфф}}$  и отсюда определять эффективный объем резонатора  $V_{\text{эфф}}$ .

Молекула движется в электромагнитном поле, плотность энергии которого составляет  $u = \frac{1}{2}\epsilon_0 E_0^2$ . Если принять доводы Эйнштейна, приведенные в гл. 16 и 18, по их фактическому значению, то это эквивалентно предположению, что возбужденная молекула оказывается стимулированной к испусканию кванта со скоростью, пропорциональной  $u$ , а невозбужденная — к поглощению кванта с той же скоростью. В действительности если в резонаторе поддерживается только одна, представляющая интерес мода, то данная точка зрения оказывается неразумной. После того как возбужденная молекула потеряла квант, ее волновая функция все еще когерентна с регулярными колебаниями электромагнитного поля, вследствие чего последующее поведение перестает быть независимым от состояния в прошлом.

Как вскоре выяснится, это не единственная неудача физических рассуждений. Несмотря ни на что, пренебрежем подобными мелочами и с наивной надеждой продолжим рассуждения. Если через время  $t$  после входа в резонатор некоторая доля молекул  $f$  все еще возбуждена, то скорость снятия возбуждения  $-\dot{f}$  можно записать как  $B_{12}uf$ . В то же время в результате довозбуждения к  $f$  добавляется величина  $B_{12}u(1-f)$ . Таким образом,

$$\dot{f} = B_{12}u(1-2f)$$

и  $f$  экспоненциально релаксирует к значению  $\frac{1}{2}$ , что свойственно устойчивому состоянию. В частности, если  $f=1$  на входе резонатора, то за время его прохождения  $f$  изменяется в соответствии с выражением  $\frac{1}{2}(1 + e^{-2B_{12}ut})$ . Среднее значение этого выражения в момент выхода описывает долю тех молекул, которые не передали свою энергию резонатору. Вследствие неизбежного разброса скоростей молекул времена пребывания варьируются в широком диапазоне. Аппроксимация, заключающаяся во введении среднего времени пребывания  $T$  в экспоненту (что мы сейчас и делаем), является не слишком хорошей. Но тем не менее общая форма поведения не претерпевает серьезного искажения.

Обозначим для молекулярного потока число возбужденных молекул, поступающих в единицу времени, через  $\Phi$ . Тогда  $\frac{1}{2}\Phi(1 + e^{-2B_{12}uT})$  молекул останутся возбужденными на выходе, а остальные отдадут энергию  $\hbar\omega_0$  резонатору или увеличат  $u$  на  $\hbar\omega_0/V_{\text{эфф}}$ . Отсюда

$$\dot{u} = \frac{1}{2}\Phi(1 - e^{-2B_{12}uT})\hbar\omega_0/V_{\text{эфф}} - u/\tau_e. \quad (20.1)$$

Здесь  $\tau_e$  — время затухания энергии для резонатора, совершающего свободные колебания. Записав  $x$  вместо  $2B_{12}uT$  и  $F\Phi_c$  [где  $\Phi_c = V_{\text{эфф}}/(B_{12}T\hbar\omega_0\tau_e)$ ] вместо  $\Phi$ , получим (20.1) в виде

$$\tau_e \dot{x} = F(1 - e^{-x}) - x. \quad (20.2)$$

Отсюда (если нужно) можно определить энергию осцилляций. Когда  $x$  мало, величина  $\tau_e \dot{x} \sim (F-1)x$ . Ясно, что роста не может быть, если только  $F > 1$ . Поэтому поток  $\Phi_c$  (как было определено выше) является критическим. Если выразить  $x$  через величины, характеризующие  $\Phi_c$ , то можно записать  $x = 2E/(\hbar Q_r \Phi_c)$ , где  $Q_r = \omega_0 \tau_e$  — собственный параметр резонатора.

В стационарном состоянии  $\dot{x} = 0$  [см. (20.2)]. Когда  $F-1 \ll 1$ ,  $x$  снижается до значений  $x_s = 2(F-1)$ , а по мере увеличения  $F$   $x_s$  асимптотически стремится к  $F$ . Вычислив среднее значение квантового числа  $\bar{n}_s$  для того колебания резонатора, которое соответствует заданному значению  $x_s$ , можно получить ясную картину возможностей лазера:

$$\bar{n}_s = V_{\text{эфф}} u_s / (\hbar\omega_0) = V_{\text{эфф}} x_s / (2B_{12}T\hbar\omega_0) = \frac{1}{2} x_s \tau_e \Phi_c. \quad (20.3)$$

В первоначальном варианте лазера поток  $\Phi_c$  составлял примерно  $10^{13}$  молекул в секунду, а  $\tau_e$  имело значение около  $10^{-7}$  с ( $Q \sim 10^4$ ), так что при  $F=2$  и  $x_s=1,6$   $\bar{n}_s \sim 10^6$ . В дальнейшем рассмотрении будем считать, что  $\bar{n}_s$  очень велико. Это позволит в отдельных случаях использовать ряд математических упрощений.

Простым численным интегрированием выражения (20.2) можно показать, как  $x$  возрастает от малого значения (когда  $F$  больше единицы) сначала экспоненциально с постоянной времени порядка  $\tau_e$ . К сожалению, эти рассуждения не учитывают того факта, что время пребывания  $T$ , составляющее около  $10^{-4}$  с, значительно больше  $\tau_e$ . Поэтому совершенно неправильно предполагать, что  $u$  практически постоянно во время прохождения молекулы и что в действительности скорость в большей мере определяется величиной  $T$ , чем величиной  $\tau_e$ . Это не приводит к усложнению выражения для  $\Phi_c$  и  $x_s$ , которые зависят от природы стационарного состояния. В основных доводах, приводящих к выражению (20.2), так много неверного, что не стоит и пытаться получить большее для нестационарного состояния (см. § 20.4).

Следующее приближение, которое мы намерены развить, в принципе гораздо глубже. Оно будет использовано при изучении отклонений от тех устойчивых состояний, в которых конфликт двух очень отличных друг от друга характеристических времен приводит к важным последствиям.



## 20.2. ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ОТКЛИК МОЛЕКУЛЯРНОГО ПУЧКА

О втором подходе к мазеру на аммиаке мы уже упоминали в гл. 11 (см. § 11.5); но теперь мы в состоянии подтвердить теоретические изыскания количественно. Функции отклика (как уже было показано ранее) возбужденного и невозбужденного состояний противоположны по знаку. Если первая увеличивает потери, то вторая, наоборот, приводит к усилению. Критический поток таков, что молекулярный пучок, который можно трактовать как диэлектрический стержень в резонаторе, как раз в состоянии своим вкладом нейтрализовать потери резонатора. Линейная теория будет развиваться дальше, но для достижения стационарного состояния колебаний нелинейности предстоит сыграть свою роль.

Нас интересует среднее значение дипольного момента типичной молекулы при ее прохождении через резонатор, частота колебаний которого не обязательно равна частоте его собственных колебаний. Прежде чем идти дальше, перечислим ряд частот и связанных с ними величин, причастных к данной теории:

$\omega_0$  — собственная (действительная) частота резонатора, естественный декремент которого описывается величиной  $\tau_e$  или  $Q_r$  ( $Q_r = \omega_0 \tau_e = 1/2 \omega_0 \tau_a$ );

$\omega_m$  — собственная частота молекулярного перехода, равная  $2\Delta_0/\hbar$ ; то значение  $Q$ , которое связано со спонтанным затуханием, огромно и не представляет интереса; однако введем в рассмотрение эффективное значение  $Q$ , связанное скорее со временем пребывания  $T$ , чем временем жизни:  $Q_m = 1/6 \omega_0 T$ ;

$\omega$  — фактическая частота мазера в его стационарном состоянии;

$\omega_e$  — расстройка пустого резонатора и молекулы, определяемая как  $1/2 (\omega_m - \omega_0)$ ;

$\omega_r$  — результирующая расстройка мазера и молекулы, определяемая как  $1/2 (\omega_m - \omega_0)$ ;

$\Omega_n$  — сдвиг частоты нормальной моды для случая, когда молекула связана с резонатором в  $n$ -м возбужденном состоянии; в соответствии с (18.36)  $\Omega_n^2 = \omega_e^2 + \gamma^2 (n+1)$ , где  $\gamma$  — постоянная связи.

Для того чтобы связать  $\gamma$  с характеристиками резонатора, заметим, что  $C$  в (18.31), умноженное на смещение  $x$ , дает энергию взаимодействия осциллятора и системы двух потенциальных ям с частотой в одной из них. Следовательно,  $Cx$  эквивалентно  $E_0 \rho_0$ , так же как при рассмотрении энергии мы считали, что  $m_0 \omega_0^2 x^2$  эквивалентно  $\epsilon_0 V_{эфф} E_0^2$ . Таким образом,  $C^2$  следует интерпретировать как  $m_0 \omega_0^2 \rho_0^2 / (\epsilon_0 V_{эфф})$ , а  $\gamma^2$  [которое есть  $C^2 / (2\hbar \omega_0 m_0)$ ] будет равно  $\omega_0 \rho_0^2 / (2\hbar \epsilon_0 V_{эфф})$ .

Введем теперь три безразмерные величины:

$$\Gamma = 2\omega_r T, \quad \Gamma_0 = \rho_0 E_0 T / \hbar = 2\gamma n^{1/2} T \quad \text{и} \quad \Gamma' = (\Gamma^2 + \Gamma_0^2)^{1/2}.$$

Для последующих рассуждений можно отметить, что  $\Gamma' = 2\Omega_n T$ , если  $\omega_e$  заменить на  $\omega_r$  и пренебречь различием между  $n$  и  $n+1$ .

Анализ, который мы проводим, разбирая рис. 18.1, позволяет

определить то, что нам нужно, а именно среднее значение дипольного момента молекулы, переходящей в возбужденное состояние и испытывающей за время пребывания в резонаторе очень большое число колебаний на частоте  $\omega$ . Точка, представляющая мгновенные значения амплитуды и фазы (по отношению к колебаниям резонатора), стартует из верхнего полюса и в течение времени  $T$  движется с угловой скоростью  $(4\omega_r^2 + \rho_0^2 E_0^2 / \hbar^2)^{1/2}$ , т. е.  $\Gamma'/T$ , по круговой орбите на сфере, вычерчивая дугу длины  $\Gamma'$ . Наклон орбиты  $\theta$  составляет  $\arctg(\Gamma/\Gamma_0)$ , а радиус орбиты —  $\cos \theta$ , т. е.  $\Gamma_0/\Gamma'$ . Центр инерции дуги легко найти, а его проекция на горизонтальную плоскость дает как действительную ( $\xi$ ), так и мнимую ( $\eta$ ) части среднего дипольного момента, выраженные через параметры  $\rho_0$ :

$$\xi = -\Gamma \Gamma_0 (\Gamma' - \sin \Gamma') / \Gamma'^3, \quad \eta = -\Gamma_0 (1 - \cos \Gamma') / \Gamma'^3. \quad (20.4)$$

В любой момент во взаимодействии участвует  $\Phi T$  молекул. Поэтому полный дипольный момент  $P_{полн}$  составляет  $\Phi T \rho_0 (\xi + i\eta)$ . Он не распределяется по всему резонатору пропорционально локальному электрическому полю, как было бы с поляризацией однородного линейного диэлектрика, но с энергетических позиций можно показать, что эффективная объемная восприимчивость  $\kappa_e$  равна  $\kappa_e' + i\kappa_e''$  и определяется как  $P_{полн} / (V_{эфф} E_0)$ . Тогда из (20.4) следует

$$\kappa_e = -[\Phi T^2 \rho_0^2 / (\epsilon_0 \hbar V_{эфф} \Gamma'^3)] \{ \Gamma (\Gamma' - \sin \Gamma') / [\Gamma' + i(1 - \cos \Gamma')] \}. \quad (20.5)$$

Знак  $\kappa_e'$  противоположен  $\Gamma$ ; при  $\omega < \omega_m$  это минус. Для молекул в нижнем состоянии поляризация на низких частотах положительна, для молекул в верхнем состоянии — отрицательна. Подобным же образом знак  $\kappa_e$  больше характеризует усилие, чем потери, характерные для нижнего состояния.

Вследствие того что  $E_0$  входит в выражение для  $\Gamma'$ ,  $\kappa_e$ , очевидно, не зависит от  $E_0$ , за исключением случая слабых полей. Тогда, не допуская большой погрешности,  $\Gamma'$  можно заменить на  $E$  или при идеальной настройке системы  $(1 - \cos \Gamma')$  — на  $1/2 \Gamma^{1/2}$ . В последнем случае  $\kappa_e = 0$ , а  $\kappa_e'' = -\Phi T^2 \rho_0^2 / (2\epsilon_0 \hbar V_{эфф})$ . Резонатор ведет себя так, как если бы он был заполнен диэлектриком с относительной диэлектрической проницаемостью  $\epsilon = 1 + \kappa_e$ , его резонансная частота смещается к значению  $\omega_0/\epsilon^{1/2}$ , т. е.  $\omega \sim \omega_0 (1 - 1/2 \kappa_e)$  при  $\kappa_e \ll 1$ . Так как мнимая часть  $\omega$  оказывается  $-1/2 \kappa_e'' \omega_0$ , время затухания для энергии будет равно  $1/(\kappa_e'' \omega_0)$ . Таким образом, если естественный декремент резонатора характеризуется определенным значением  $\tau_e$ , то критический поток, необходимый для его преодоления таков, что  $\kappa_e'' = -1/(\omega_0 \tau_e) = -1/Q_r$ . Следовательно,

$$\Phi_e = 2\epsilon_0 \hbar V_{эфф} / (Q_r \rho_0^2 T^2) = 1/(\tau_e \gamma^2 T^2). \quad (20.6)$$

Выражение (20.5) можно переписать так:

$$\kappa_e = -[2F / (Q_r \Gamma'^3)] [\Gamma (\Gamma' - \sin \Gamma') / \Gamma' + i(1 - \cos \Gamma')], \quad (20.7)$$

где, как и в (20.2),  $F = \Phi / \Phi_e$ .



Прежде чем перейти к обсуждению выводов из этого результата, заметим, что сравнение двух выражений для  $F_c$ , (20.6) и вытекающего из (20.1), показывает, какое значение нужно приписать коэффициенту стимулированного излучения  $B_{12}$ :

$$B_{12} = p_0^2 T / (2 \varepsilon_0 \hbar^2).$$

Появление в этом выражении времени  $T$  вызывает серьезные сомнения в аргументации: ведь коэффициент  $B_{12}$  был введен для определения скорости спада возбуждения молекулы в поле с заданной

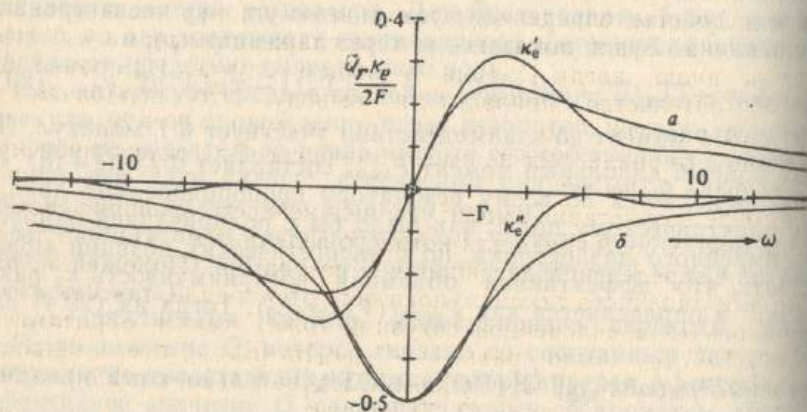


Рис. 20.1. Действительная ( $\kappa_e'$ ) и мнимая ( $\kappa_e''$ ) части восприимчивости потока возбужденных молекул аммиака в сравнении с соответствующими кривыми (а и б) для лоренцевского резонанса для случая, когда  $\Gamma=0$

плотностью энергии без учета того, как долго молекуле придется пребывать в этом поле. Те рассуждения, которые несправедливо были названы доводами Эйнштейна, включали предположение, что вероятность спада возбуждения вначале пропорциональна времени, прошедшему после наложения поля резонатора. Это приемлемо только в том случае, если на молекулу одновременно действует большое число некогерентных мод. Если же имеется только одна мода, то вероятность первоначально пропорциональна  $t^2$ , а появление другой, подобной времени величины в данном выражении обусловлено лишь соображениями размерности. К сожалению, хотя обращение к аргументации Эйнштейна и связано с физической интуицией, но в количественном отношении она содержит существенные недостатки.

Вернемся к диэлектрическому приближению для случая, когда амплитуда колебаний настолько мала, чтобы  $\Gamma'$  можно заменить на  $\Gamma$  и  $\kappa_e$  имеет вид, показанный на рис. 20.1. Пульсация на краях кривых, являющаяся следствием предположения, что  $T$  одинаково для всех молекул, оказалась бы сглаженной в любом реальном устройстве. Даже без сглаживания общая форма кривой очень близка

к лоренцевскому отклику простой резонансной системы. После сглаживания соответствие, по всей видимости, было бы еще лучше. Лоренцевские кривые, изображенные для сравнения, составляют действительную и мнимую части выражения  $-(iF/Q_r)/(1+1/3i\Gamma)$ , которое подобрано так, чтобы согласовывать наклон  $\kappa_e'$  и абсолютное значение  $\kappa_e''$  при  $\Gamma=0$ . Ширина этой кривой  $\Delta\Gamma$  равна 6, так что полоса частот составляет  $6/T$ , что соответствует значению  $Q$ , равному  $1/6\omega_0 T$ , т. е. той величине, которая была выбрана для определения  $Q_m$  — коэффициента молекулярного перехода. Обычно  $Q_m$  принимает значение  $10^6$ . Именно время пребывания, а не спонтанное излучение, определяет эффективную ширину квазирезонансного отклика. Будет показано, что несглаженная форма  $\kappa_e''$  стремится к нулю, когда  $\Gamma$  (или в общем случае  $\Gamma'$ ) равно  $2\pi$ . Это обстоятельство приводит к выводу, что колебания не могут нарастать до точки, в которой  $\Gamma'=2\pi$ , и все точки вне интервала  $\pm 2\pi$  не имеют значения. Для сглаженной кривой это было бы не так.

По мере возрастания амплитуды нелинейность приводит систему к устойчивому состоянию, для которого величина  $\kappa_e''$  как раз достаточна для определения диссипации в резонаторе. Положения, развитые для линейного отклика, пока остаются в силе, так как  $\kappa''$  определялось (и в нелинейной ситуации тоже) таким образом, что  $-1/2\kappa_e'' \varepsilon_0 E_0^2 V_{\text{эфф}}$  было равно  $-1/2\varepsilon_0 E_0 \text{Im}[P_{\text{полн}}]$ , т. е. мощности, приносимой молекулярным пучком. Следовательно, в стационарном состоянии  $\kappa_e'' = -1/Q_r$  и из (20.7) следует

$$2F(1 - \cos \Gamma') = \Gamma'^2, \text{ или } F = [1/2\Gamma'/\sin(1/2\Gamma')]^2. \quad (20.8)$$

Таким образом,  $\Gamma'$  однозначно определяется значением  $F$ . Тогда из (20.7) следует, что в стационарном состоянии  $F$  и расстройка однозначно определяют  $\kappa_e'$ . Итак, продолжая эти рассуждения, мы сможем найти частоту колебаний  $\omega$  в стационарном состоянии.

Чтобы установить роль  $\kappa_e'$  действительной части восприимчивости, нужно заменить  $\omega_0$  на  $\omega_0(1 - 1/2\kappa_e')$  и, поскольку  $\omega - \omega_0 = 2(\omega_e - \omega_r)$ , получаем из (20.7)

$$\omega_e - \omega_r = 1/4\omega_0 \kappa_e' = [F\omega_0 T / (Q_r \Gamma'^2)] / (\Gamma' - \sin \Gamma'). \quad (20.9)$$

Здесь вместо  $\Gamma$  подставлено  $\omega_r T$ . Следовательно,

$$\omega_r / \omega_e = [1 + F\omega_0 T (\Gamma' - \sin \Gamma') / (Q_r \Gamma'^2)]^{-1}, \quad (20.10)$$

или, поскольку вторая величина преобладает,

$$\omega_r / \omega_e \sim (Q_r / Q_m)(1 - \cos \Gamma')\Gamma' / [3(\Gamma' - \sin \Gamma')] = (Q_r / Q_m)R(F). \quad (20.11)$$

В этом соотношении  $F$  связано с  $\Gamma'$  выражением (20.8). При типичном времени пребывания  $10^{-4}$  с оказывается, что  $Q_m \sim 2.5 \cdot 10^6$ . Как раз большая величина отношения  $Q_m / Q_r$  и оправдывает при нормальных условиях аппроксимацию (20.11).



Определенная из (20.11) функция  $R(F)$  равна единице, если разность  $F-1$  мала, и, хотя и медленно, уменьшается с увеличением  $F$ , как показано на рис. 20.2. В соответствии с принятым масштабом получаем для  $\omega_r$  значение в 250 раз меньшее, чем для  $\omega_e$  — молекула, имея гораздо более острый резонанс, чем резонатор, почти полностью определяет результирующую частоту, хотя и не так эффективно, когда  $F$  велико. Однако если поступление (молекулярного потока) преобладает над потерями, то  $Q_r$  можно уменьшить, на

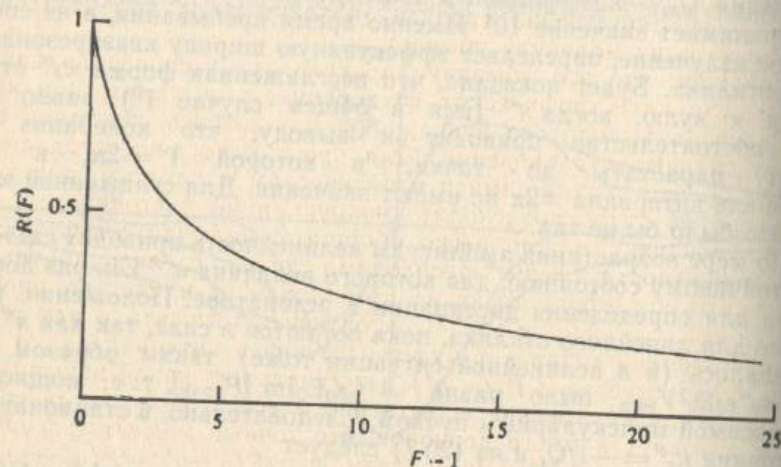


Рис. 20.2. Изменение  $R(F)$ , получаемое в соответствии с выражением (20.11)

пример, изъятием большей мощности из резонатора до такого предела, который необходим для поддержания работы мазера. При снижении таким образом значения  $Q_r$  усиливается осуществляемый молекулами контроль над частотой. Именно эта чрезвычайно высокая степень влияния на частоту, осуществляемого молекулами, и служит одним из тех факторов, которые делают мазер надежным стандартом частоты. Мазер на аммиаке хотя и хорош, однако не является наилучшим для этих целей. В конце этой главы мы опишем более подходящую систему (см. § 20.9) — мазер на водороде, созданный Рамсеєм.

Приводимый здесь анализ устанавливает и допустимую степень расстройки при заданном молекулярном потоке. Так как (20.8) имеет решение для случая возникновения стационарных колебаний, оказывается, что максимум расстройки должен быть таким, чтобы  $\Gamma'$  стремилось к  $\Gamma$ , а не к  $\Gamma_0$ , т. е.

$$F = [1/2 \Gamma_{\max} / \sin(1/2 \Gamma_{\max})]^2. \quad (20.12)$$

Для этой несглаженной модели  $\Gamma_{\max}$  не может превышать значение  $2\pi$ . Поэтому  $|\omega_r| < \pi/T \sim \omega_0/Q_m$ . Это примерно то, что уже было получено как следствие из принципа неопределенности.

### 10.1. ФЛУКТУАЦИИ АМПЛИТУДЫ И ФАЗЫ

В гл. 11 было показано, как воздействие белого шума на осциллятор (см. § 11.9) управляется величиной  $Q_{\text{sat}}$ , определяемой через скорости возвращения амплитуды к устойчивому состоянию после возмущения. В обсуждающемся случае  $Q_{\text{sat}}$  было таким же, как и собственное значение  $Q_r$  невозбужденного резонансного контура. Однако это не всегда так. В последующем изложении будет учтено то общее, о чем говорилось в гл. 11. Главное в полученном там результате состоит в том, что если состояние осциллятора представить вектором с определенными амплитудой и фазой, то конец этого вектора перемещается случайным образом. Но если блуждания амплитуды ограничены радиальной возвращающей силой и нет подобного ограничения для тангенциального движения, то беспрепятственно дрейфует фаза колебаний.

Нечто подобное обнаруживается и в мазере, подверженном воздействию шума. Однако детали в нескольких важных отношениях различны. В основе различий лежит тот факт, что колебания мазера поддерживаются источником, имеющим намного более острый резонанс, чем та система, которую он возбуждает. В колебательном же контуре усилитель имеет очень плоскую частотную характеристику. Указанное обстоятельство удлинит анализ. В самом деле, пока модель тщательно не разработана, математические осложнения довольно велики; оказывается, что значение, которое необходимо придать  $Q_{\text{sat}}$ , гораздо ближе к  $Q_m$  (а оно имеет порядок  $\omega_0 T$ ), чем к  $Q_r$ , и белый шум не является результатом чисто диффузионного процесса для амплитуды и фазы.

Чтобы облегчить анализ, предположим, что не все молекулы имеют одно и то же время пребывания в резонаторе  $T$ , а существует их экспоненциальное распределение, вследствие чего через время  $t$  только  $e^{-t/T}$  молекул когерентно отреагируют на воздействие на поля. Остальные молекулы либо покинули резонатор, либо претерпели такие соударения, после которых вышли из игры. Это довольно хорошее приближение к тому, что происходит в мазере на водороде.

В отношении этого мазера, который можно рассматривать как стандарт частоты, теория становится более конкретной. Ограничимся только случаем идеальной настройки, когда в соответствии с рис. 18.1 электрическое поле  $E_0$  направлено вдоль  $\eta$  до тех пор, пока шум не нарушает этого. При входе в резонатор возбужденная молекула представлена точкой у северного полюса  $N$  с координатами  $(0, 0, 1)$ . Пока  $E_0$  постоянно (и молекула не вышла из игры), точка движется по часовой стрелке вокруг оси  $\eta$  с угловой скоростью  $p_0 E_0 / \hbar$ . Для того чтобы найти значение  $P_{\text{полн}}$ , соответствующее стационарному состоянию, нужно знать векторную сумму смещений относительно начала координат  $R$  для всех молекул, которые принимают участие в процессе. Тогда  $P_{\text{полн}}$  окажется измененной в  $p_0$  раз проекций  $R$  ( $OR$  на рис. 20.3, а) на плоскость  $(\xi, \eta)$ ,  $P$  зависит от трех видов движения, которые в стационарном состоянии должны



быть сбалансированными: поле вызывает тангенциальное движение со скоростью  $R\rho_0 E_0/\hbar$ , истощение потока с постоянной времени  $T$  вызывает движение в направлении начала координат со скоростью  $R/T$ , поступление новых невозбужденных молекул приводит к перпендикулярному движению со скоростью  $\Phi$ . Эти процессы удобно выразить, рассматривая  $R$  как комплексное число, т. е. записав  $R = \xi + i\zeta$ . Тогда

$$\dot{R} = -i(\rho_0 E_0/\hbar)R - R/T + i\Phi. \quad (20.13)$$

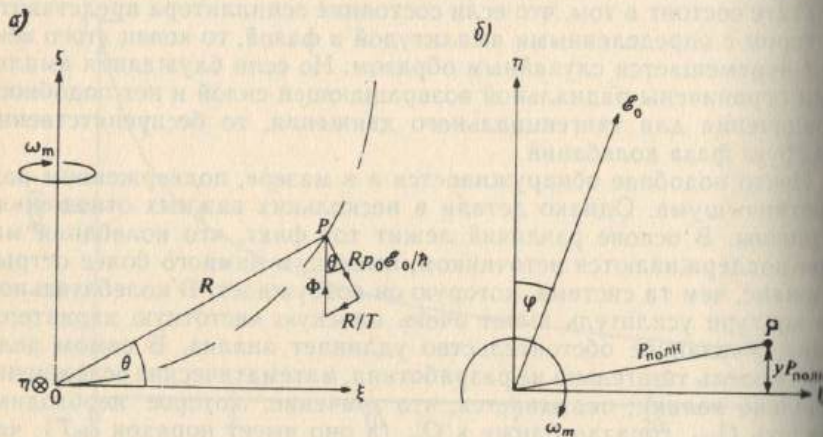


Рис. 20.3. На  $\xi$ — $\zeta$ -сечении (см. рис. 18.1) показаны конкурирующие процессы, которые сбалансированы в устойчивом состоянии системы с двойной потенциальной ямой (а); б — иллюстрация вычислений сдвига фазы, вызванного шумом

Для стационарного состояния, когда  $\dot{R} = 0$ ,

$$R = R_0 = i\Phi T/(1 + i\Gamma_0), \quad (20.14)$$

где  $\Gamma_0$  фактически имеет прежнее значение  $\rho_0 E_0 T/\hbar$ . По мере увеличения  $E_0$   $R_0$  перемещается на рисунке по дуге окружности и  $\text{ctg } \theta = \Gamma_0$ .

Полная поляризация  $P_{\text{полн}}$  равна  $\rho_0 \text{Re}[R_0]$ , т. е.  $\Phi\rho_0 T\Gamma_0/(\Gamma_0^2 + 1)$ , и сдвинута по фазе относительно  $\varepsilon_0$  на  $\pi/2$ . Таким образом,

$$\kappa_e'' = -P_{\text{полн}}/(\varepsilon_0 E_0 V_{\text{эфф}}) = -\Phi\rho_0^2 T^2/[\hbar\varepsilon_0 V_{\text{эфф}}(\Gamma_0^2 + 1)] = -F/[Q_r(\Gamma_0^2 + 1)], \quad (20.15)$$

где, как и раньше,  $F = \Phi/\Phi_c$  и  $\Phi_c = \hbar\varepsilon_0 V_{\text{эфф}}/(Q_r\rho_0^2 T^2)$ .

Выражение для  $\Phi_c$  вытекает из требования, чтобы в начальный момент, когда  $F=1$  и  $\Gamma_0$  мало,  $\kappa_e''$  было равно по величине и противоположно по направлению  $1/Q_r$ , связанной с потерями в резонаторе. Когда  $F>1$ , то для стационарного состояния  $\Gamma_0^2 + 1 = F$ , т. е.  $\sin \theta = 1/F^{1/2}$ .

Для того чтобы оценить эффект малых произвольных возмущений, в результате которых  $P$  перемещается от  $R$  к точке  $R_0 + \rho$ , при этом не обязательно в той же плоскости, вернемся ненадолго к векторному толкованию. Пусть за одно и то же время  $\varepsilon_0$  становится равным  $E_0(1 + \delta)$ , а фаза колебаний изменяется на  $\varphi$ . Тогда  $E_0$  уже не направлено вдоль оси  $\eta$ , а составляет с нею угол  $\varphi$ . Все возмущения предполагаются достаточно малыми, чтобы оправдать линейную аппроксимацию. Последующую релаксацию системы в стационарное состояние можно расчленить на два независимых процесса: движение  $P$  в плоскости  $R_0$  и движение, нормальное к этой плоскости. Если  $\varphi=0$  и  $\rho$  лежит в плоскости  $(\xi, \zeta)$ , то компонента поляризации, совпадающая по фазе с  $\varepsilon_0$ , отсутствует, так что  $\kappa_e''$  остается равным нулю и частота колебаний не затрагивается. Следовательно,  $\varphi$  остается равной нулю и  $\rho$  перемещается только по плоскости. Наоборот, если  $\rho$  имеет только  $\eta$ -компоненту, то  $\kappa_e''$  для всей системы остается равным нулю и амплитуда колебаний не меняется. Однако в этом случае совпадающая по фазе с  $\varepsilon_0$  компонента  $P_{\text{полн}}$  приводит к не равному нулю значению  $\kappa_e'$ , вследствие чего частота меняется и  $\varphi$  релаксирует к новому устойчивому состоянию. Это не обязательно состояние с  $\varphi=0$ , поскольку единственным условием, необходимым для стабилизации частоты на значении  $\omega_0$ , является то, чтобы плоскость, в которой находится  $P$ , была нормальной к  $E_0$ . Разумеется, именно потому шум вызывает дрейф фазы.

Приступая к рассмотрению релаксации амплитуды, придется вновь воспользоваться комплексной символикой для плоскости  $(\xi, \zeta)$ . Если  $R = R_0 + \rho$ , а  $\varepsilon_0$  меняется до значения  $E_0(1 + \delta)$ , то (20.13) принимает в первом приближении линейную форму относительно  $\rho$  и  $\delta$ :

$$\dot{\rho} = -[\rho(1 + i\Gamma_0) + i\Gamma_0 R_0 \delta]/T. \quad (20.16)$$

Это соотношение показывает, как  $\rho$  откликается на заданное изменение  $E_0$ , выражаемое через  $\delta(t)$ . К соотношению (20.16) следует добавить уравнение, показывающее отклик  $E_0$  на заданное изменение во времени величины  $\rho_0 \text{Re}[\rho]$ , составляющее изменение в  $P_{\text{полн}}$ . Вследствие того что соответствующее стационарное состояние значение  $P_{\text{полн}}$  претерпевает частичное изменение  $\text{Re}[\rho]/\text{Re}[R_0]$  в то время, когда поле испытывает частичное изменение  $\delta$ , соответствующее изменение молекулярного вклада в  $\kappa_e''$  можно записать так:

$$\Delta\kappa_e''/\kappa_e'' = \rho_0 \text{Re}[\rho]/P_{\text{полн}} - \delta = x - \delta. \quad (20.17)$$

Здесь  $x$  — действительная часть величины  $\rho\rho_0/P_{\text{полн}}$ , т. е. величины  $(\Gamma_0^2 + 1)\rho/(\Phi\Gamma_0 T)$ . Сами по себе потери резонатора привели бы к убыванию поля с постоянной времени  $\tau_a$ . Этот процесс нейтрализовался бы  $\kappa_e''$ , принимающим значение, соответствующее стационарному состоянию. Однако в соответствии с (20.17) постоянная вре-



мени для усиления составляет  $\tau_a/(1+\Delta\kappa_e''/\kappa_{ae}'')$ , или  $\tau_a/(1+x-\delta)$ . Следовательно,

$$\frac{d}{dt}[E_0(1+\delta)] = E_0(1+\delta)[-1/\tau_a + (1+x-\delta)/\tau_a].$$

Поэтому

$$\dot{\delta} = (x-\delta)/\tau_a \text{ в первом порядке по } \delta \text{ и } x. \quad (20.18)$$

Если  $z$  записать для мнимой части величины  $\rho\rho_0/P_{\text{полн}}$ , то действительная и мнимая части (20.16) дадут в дополнение к (20.18) еще два уравнения:

$$\dot{x} = -(x - \Gamma_0 z - \delta)/T \text{ и} \quad (20.19)$$

$$\dot{z} = -(z + \Gamma_0 x + \Gamma_0 \delta)/T. \quad (20.20)$$

Связь  $x$  и  $z$  в этих уравнениях возникает благодаря присутствию выражения  $1+i\Gamma_0$  в (20.16). Вследствие этого  $P$  релаксирует к равновесию не по прямой линии, а по спирали, которая может сходиться совсем медленно, если  $F$ , а следовательно, и  $\Gamma_0$  велики. Соответственно амплитуда  $E_0$  может также обладать колебательной релаксацией, хотя, как будет сейчас показано, этот эффект незначителен.

Уравнения (20.18)–(20.20) приводят к уравнению третьего порядка для  $\delta$ :

$$\alpha T^3 \ddot{\delta} + (1+2\alpha) T \ddot{\delta} + [1 + \alpha(\Gamma_0^2 + 1)] T \dot{\delta} + 2\Gamma_0^2 \delta = 0.$$

Здесь величина  $\alpha = \tau_a/T$  очень мала. Решения всех трех уравнений можно записать в форме  $e^{-\lambda t}$ , где

$$\lambda \doteq [1 \pm i(8\Gamma_0^2 - 1)^{1/2}]/(2T) \text{ или } 1/\tau_a. \quad (20.21)$$

Первые два решения дают колебательную релаксацию, если  $F > 9/8$ . Они описывают гораздо более медленный процесс, чем третье решение. Выражение (20.18) показывает, что  $\delta$  приближается к своему мгновенному значению  $x$  для стационарного состояния с постоянной времени  $\tau_a$ , характерной для резонатора. В то же время соотношения (20.19) и (20.20) показывают, что сами  $x$  и  $z$  ограничены эффективным временем пребывания молекул тем больше, чем медленнее вариации собственных изменений. Это облегчает подбор адекватного решения минуя утомительный процесс точного решения кубического уравнения.

Предположим, что на резонатор действует некоторый импульсный источник шумов, который вызывает столь малые изменения  $E_0$ , что в момент  $t=0$   $\delta = \delta_0$  и  $x = z = 0$ . Тогда за короткий промежуток времени, равный нескольким  $\tau_a$  (прежде чем  $x$  и  $z$  успеют заметно измениться),  $\delta$  прорелаксирует до значения  $x$ , очень близкого к нулю:

$$\delta \doteq \delta_0 e^{-t/\tau_a}. \quad (20.22)$$

В этом случае разумно решать уравнения (20.19) и (20.20) в предположении, что в течение указанного промежутка времени  $x$  и  $z$  равны нулю, т. е. в данных уравнениях  $\delta$  выступает как эффективный импульсный источник, тотчас после действия которого  $x(+0) = \alpha\delta_0$  и  $z(+0) = -\Gamma_0\alpha\delta_0$ . Следовательно, для соотношения (20.21) важны только медленные решения, которые удастся согласовать с начальными условиями, записав

$$\left. \begin{aligned} x = \delta &= (\alpha\delta_0 \operatorname{cosec} \varepsilon) e^{-t/(2T)} \sin(\chi t + \varepsilon), \\ \Gamma_0 z &= (\alpha\delta_0 \operatorname{cosec} \varepsilon) e^{-t/(2T)} \times \\ &\times \left[ \chi T \cos(\chi T + \varepsilon) - \frac{1}{2} \sin(\chi t + \varepsilon) \right]. \end{aligned} \right\} \quad (20.23)$$

Здесь  $\chi$  обозначает частоту  $(8\Gamma_0^2 - 1)^{1/2}/(2T)$ , заданную условием (20.21), а  $\operatorname{tg} \varepsilon = -2\chi T/(2\Gamma_0^2 - 1)$ .

Последующее за начальным импульсом изменение  $\delta$  складывается из быстрого затухания первичного отклика (20.22) и продолжительного медленного вторичного колебания в соответствии с первым из уравнений (20.23). Фурье-разложение импульсного отклика определяет спектр флуктуации  $\delta$  в том случае, когда на вход резонатора поступает белый шум. В частности, низкочастотные ( $\omega T \ll 1$ ) компоненты флуктуации просто пропорциональны интегралу по времени от импульсного отклика. Проведя интегрирование, получаем, что вторичное колебание меняет только величину интеграла (20.22) от  $\delta_0\tau_a$  до  $\delta_0\tau_a(\Gamma_0^2 + 1)/(2\Gamma_0^2)$  или  $\frac{1}{2}\delta_0\tau_a(1 - 1/F)$ . Для  $F > 2$

низкочастотные флуктуации уменьшаются, но не принимают значений меньше половины амплитуды пассивного резонатора. Что же касается амплитудных флуктуаций, то здесь мазер мало чем отличается от вынужденного колебательного контура с  $Q_{\text{sat}} \sim Q_r$ .

То же самое нельзя сказать о дрейфе фазы, значительно уменьшенном в мазере. Предположим теперь (рис. 20.3, б), что  $P$  смещено относительно плоскости  $(\xi, \zeta)$  на величину  $y$  так, чтобы дать дополнительный полный момент  $yP_{\text{полн}}$ . В отсутствие сдвига фазы для  $E_0$  это создает действительную восприимчивость  $\kappa_e'$ , равную  $yP_{\text{полн}}/(e_0 E_0 V_{\text{эфф}})$ , т. е.  $y/Q_r$ , как следует из (20.15). Однако если  $E_0$  опережает по фазе на величину  $\Phi$ , то та компонента момента, которая параллельна  $E_0$ , возрастает и

$$\kappa_e' = (y + \Phi)/Q_r = 2(y + \Phi)/(\omega_0 \tau_a). \quad (20.24)$$

Компонента  $E_0$ , нормальная к плоскости  $P$ , не имеет изменений в первом порядке, и если бы  $E_0$  сохранило ориентацию в направлении  $\Phi$ , то  $P$ , по мере того как молекулы становятся неэффективными и заменяются другими, релаксировало бы обратно к плоскости, нормальной к  $E_0$ , с постоянной времени  $T$ . Отсюда

$$\dot{y} = -(y + \Phi)/T. \quad (20.25)$$



Однако с учетом соотношения (20.24) частота резонатора несколько уменьшается, так что

$$\dot{\Phi} = -\frac{1}{2} \kappa' \omega_0 = -(y + \Phi)/\tau_a. \quad (20.26)$$

Из соотношений (20.25) и (20.26) получаем

$$\left. \begin{aligned} \ddot{\Phi} &= -\mu \dot{\Phi}, \text{ где } \mu = 1/\tau_a + 1/T; \\ \text{тогда } \Phi &= \Phi_1 + \Phi_2 e^{-\mu t}, \\ \text{а из (20.25) имеем } y &= -\Phi_1 + \alpha \Phi_2 e^{-\mu t}, \\ \text{где, как и раньше, } \alpha &= \tau_a/T. \end{aligned} \right\} \quad (20.27)$$

Если эффект шумового воздействия состоит в том, чтобы вызвать начальное смещение фазы  $\Phi_0$  без немедленного изменения поляризации, то  $\Phi(0) = \Phi_0$  и  $y(0) = 0$ . Следовательно,  $\Phi_1 + \Phi_2 = \Phi_0$  и  $\Phi_1 = \alpha \Phi_2$ , т. е.

$$\Phi = \Phi_0 (e^{-\mu t} + \alpha)/(1 + \alpha).$$

Немедленный сдвиг фазы быстро устраняется молекулами. Через время порядка нескольких времен  $\tau_a$  он уменьшается до значения  $\alpha \Phi_0$ , причем  $\alpha \ll 1$ . В соответствии с соотношением (11.44) гауссовское распределение разброса фазы за время  $t$  для заданного значения интенсивности шумов обратно пропорционально индуктивности контура и, следовательно,  $Q_r$  (так как данный источник шума предполагает, что  $R$  постоянно). Полученный результат показывает, что фазовый дрейф контролируется молекулярным резонансом, для которого  $Q_m = \omega_0 T$ , а не резонатором с  $Q_r = \omega_0 \tau_a$ . Грубо говоря, получается так, как если бы следовало рассматривать резонатор и возбужденные молекулы в качестве единой системы, в которую возбужденные молекулы вносят так много энергии, что полная энергия колебаний (это нетрудно показать) примерно в  $Q_m/Q_r$  раз больше, чем энергия только одного поля. Однако потери и шум обусловлены исключительно самим резонатором. Поэтому комбинированная система ведет себя как простой колебательный контур с временем затухания  $T$  и с усиленной соответственно стабильностью фазы.

Случайные шумы на входе не являются единственным источником флуктуаций. Статистические изменения в потоке молекул вызывают вариации амплитуды, но не приводят к фазовому дрейфу в хорошо настроенной системе.

Можно показать, что этот процесс сходен с тепловым шумом, соответствующим температуре, близкой к  $\hbar \omega_0/k_B$ , которая в несколько сотен раз меньше обычной для лазера на аммиаке комнатной температуры. Этот эффект имеет значение для оптических лазеров, для которых  $\hbar \omega_0 \gg k_B T$ , но здесь мы не будем заниматься анализом явления. Вдобавок в нашем случае имеется уже упоминавшийся чисто квантовый источник шума, для которого совершенно не

подходит анализ в терминах диэлектрического отклика. Этот источник оказывает действие как на фазу, так и на амплитуду, вызывая флуктуации и той, и другой величины. Этот источник выплывает автоматически как случайная деталь очень строгого квантового рассмотрения, цель которого — оправдать диэлектрический подход. Но независимо от сказанного рассмотрение всей проблемы представляется долгим делом. Разумно ожидать, что молекулы сглаживают любой процесс так же, как это происходит с тепловым шумом. Молекулы взаимодействуют друг с другом не непосредственно, а через воздействие на поле резонатора. Поэтому любое, вызванное какой-нибудь молекулой возмущение фазы, будь оно квантовой или статистической природы, в первую очередь меняет  $\epsilon$ . Это изменение впоследствии при реагировании других молекул уменьшается в  $\tau_a/T$  раз.

#### 10.4. КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОЛЕКУЛА — РЕЗОНАТОР

Как только молекула и резонатор вступают во взаимодействие, их волновые функции становятся неотделимо связанными друг с другом. Это длится до тех пор, пока изменение состояния резонатора не приведет к началу нового взаимодействия. Представляет интерес вероятное состояние резонатора после того, как мазер проработал некоторое время свободно. Поэтому в сложной волновой функции мы должны сохранить информацию о всех молекулах, которые прошли через резонатор за это время. Доказать это не так сложно, как можно было бы ожидать, поскольку покинувшие резонатор молекулы больше не связаны ни с ним, ни между собой. Стационарные состояния ансамбля несвязанных систем представляют собой простые произведения собственных функций отдельных компонент ансамбля.

Позволим себе сделать одно не соответствующее фактам упрощение. Пусть в любой момент времени во взаимодействии с резонатором находится только одна молекула, а полный эффект резонатора представляет собой сумму всех единичных взаимодействий. Для предстоящего обсуждения (и в какой-то мере в духе аппроксимации Хартри) можно предположить, что резонатор и все молекулы, за исключением одной выбранной для наблюдения молекулы, связаны столь сильно, что ведут себя как единый резонатор с декрементом, скорее связанным с величиной  $T$ , чем с величиной  $\tau_a$ . Получается упрощенная модель, основанная на предположении, что в любой момент в объеме резонатора «действует» только одна молекула. Но тогда (в случаях, когда это оправдано) величину  $Q_r$  можно заменить величиной  $Q_m$ . Аналогично, несмотря на то что пустой резонатор может быть расстроен по отношению к частотам молекул на величину  $\omega_e$ , в конечном итоге вследствие комбинированного действия всех присутствующих молекул расстройка уменьшается до значения  $\omega_r$ . Будем считать, что  $\omega_r$  представляет собой рас-



стройку одной произвольной молекулы за время ее прохождения через резонатор. Претендуя на строгость изложения, возможно, не следовало бы прибегать к подобным допущениям. Но в противном случае анализ настолько осложнится, что может заслонить физическую сторону происходящего.

Согласно принятым здесь предположениям, квантовая механика во всех случаях сводится к крайне простой операции. Проследим за одной молекулой, проходящей через резонатор, с тем чтобы выяснить, как при этом меняется волновая функция всех элементов системы. В частности, определим эволюцию величины  $P(x, t)$  — вероятности того, что в момент времени  $t$  смещение гармонического осциллятора, представляющего резонатор, составляет  $x$ . Нас интересуют молекулы как таковые, важно лишь состояние моды резонатора, изменяющееся в результате их взаимодействий с резонатором.

Будем дальше считать, что каждая молекула проводит в резонаторе одно и то же время  $T$ . По сравнению с последним параграфом будем в меньшей мере пользоваться экспоненциальным расчленением молекул по временам пребывания.

Анализ имеет различия в деталях в зависимости от состояния молекулы в момент поступления в резонатор. Проведем полный анализ для одной возбужденной молекулы, а в конце его укажем на изменения, которые следует внести для невозбужденной молекулы. Перед самым входом молекулы в резонатор волновую функцию всей системы можно представить разложением Фурье по собственным функциям многих молекул, каждая из которых представляет произведение отдельных собственных функций, например колебательную функцию  $\psi_n(x)$ , поскольку все они независимы друг от друга. Используем, например, семейство двухуровневых функций  $\chi_{1,2}(q_i)$  молекул, поступивших в резонатор в предыдущие моменты времени, и начальную волновую функцию выбранной новой молекулы  $\chi_2(y)$ . Функции  $\chi(q_i)$  остаются несвязанными, и их произведение можно объединить в единую функцию  $U_m(q_i)$ . Вследствие того что одна и та же функция  $\chi_2(y)$  фигурирует во всех собственных функциях, описывающих начальное состояние, представим волновую функцию всего ансамбля на выходе следующим образом ( $t=0$ ):

$$\psi(x, y, q_i; 0) = \chi_2 \sum_n \sum_m A_{nm} \psi_n U_m. \quad (20.28)$$

Здесь выбор величин  $A_{nm}$  позволяет включить все возможные случаи. Как только новая молекула оказывается связанной с резонатором, функция  $\chi_2 \psi_n$  перестает быть их совместной собственной функцией. Ее нужно переписать в виде суммы истинных собственных функций, как это предлагается в соотношении (18.33):

$$\psi(x, y, q_i; 0) = \sum_n \sum_m A_{nm} U_m [\beta_n (\alpha_n \chi_1 \psi_{n+1} + \beta_n \chi_2 \psi_n) - \alpha_n (\beta_n \chi_1 \psi_{n+1} - \alpha_n \chi_2 \psi_n)]. \quad (20.29)$$

Здесь  $\alpha_n$  и  $\beta_n$  положительны и определяются из соотношения (18.38). Теперь обе величины в выражении (20.29) совершают колебания на разных частотах. Никакие вариации времени, свойственные всем собственным функциям в (20.29), не играют роли. Поэтому мы можем пренебречь колебаниями, связанными с  $U_m$ , и считать, что обе величины в квадратных скобках имеют частоты  $(n+1)\omega \pm \Omega_n$ , где  $\Omega_n$  определяются из (18.36), при замене  $\omega_e$  на  $\omega_r$ . Следует также заметить, что вместо  $\omega_0$  используется результирующая частота  $\omega$ . Тогда

$$\Omega_n = [\omega_r^2 + \gamma^2(n+1)]^{1/2}. \quad (20.30)$$

$\Omega_n$  имеет тот же знак, что и  $\omega_r$ .

Для того чтобы выяснить, как развивается функция  $\Psi$ , необходимо первое слагаемое в (20.29) умножить на  $\exp i [-(n+1)\omega - \Omega_n]t$ , а второе — на  $\exp i [-(n+1)\omega + \Omega_n]t$ . Тогда после некоторой перегруппировки получим

$$\Psi(x, y, q_i; t) = e^{-i\omega t} \sum_n \sum_m U_m \psi_n [A_{nm} \chi_2 (\beta_n^2 e^{-i\Omega_n t} + \alpha_n^2 e^{i\Omega_n t}) - 2i A_{n-1,m} \alpha_{n-1} \beta_{n-1} \chi_1 \sin \Omega_{n-1} t] e^{-i(n+1)\omega t}. \quad (20.31)$$

Теперь

$$P(x, t) = \int \dots \int \Psi^* \Psi dq_i dy. \quad (20.32)$$

Если  $\Psi^*$  записать в той же форме, что и в соотношении (20.31), но с индексами  $k$  и  $l$  вместо  $n$  и  $m$ , то интегралы по  $q_i$  поддаются разделению, тогда

$$\int \dots \int U_k^* U_m dq_i = \delta_{k,m}.$$

Таким образом, величины, содержащие  $U$ , исчезают из соотношения (20.32), и оно принимает вид

$$P(x, t) = \sum_l \sum_m \sum_n e^{i(l-n)\omega t} \int \psi_l^* \psi_n dy [A_{ln}^* \chi_2^* e^{i\omega t} (\beta_l^2 e^{i\Omega_l t} + \alpha_l^2 e^{-i\Omega_l t}) + 2i A_{l-1,n}^* \alpha_{l-1} \beta_{l-1} \chi_1^* \sin \Omega_{l-1} t] [A_{n,m} \chi_2 e^{-i\omega t} (\beta_n^2 e^{-i\Omega_n t} + \alpha_n^2 e^{i\Omega_n t}) - 2i A_{n-1,m} \alpha_{n-1} \beta_{n-1} \chi_1 \sin \Omega_{n-1} t]. \quad (20.33)$$

Поскольку  $\chi_1$  и  $\chi_2$  ортогональны и нормированы, интегрирование оказывается тривиальным. Получаем

$$P(x, t) = \sum_l \sum_n e^{i(l-n)\omega t} \psi_l^* \psi_n [\beta_l^2 e^{i\Omega_l t} + \alpha_l^2 e^{-i\Omega_l t}] \times (\beta_n^2 e^{-i\Omega_n t} + \alpha_n^2 e^{i\Omega_n t}) + 4\alpha_{l-1,n-1} \alpha_{l-1} \beta_{l-1} \alpha_{n-1} \beta_{n-1} \sin \Omega_{l-1} t \sin \Omega_{n-1} t]. \quad (20.34)$$



Здесь  $\rho_{ln}$  — матрица плотности:

$$\rho_{ln} = \sum_m A_{lm}^* A_{nm} = \rho_{nl}^*. \quad (20.35)$$

Если исходные волновые функции были нормированными, то автоматически выполняется условие  $\sum_n \rho_{nn} = 1$ . В этом и состоит суть квантово-механического подхода, который продолжим интерпретировать дальше.

Для момента входа молекулы ( $t=0$ ) запишем  $\rho_{ln}$  как  $\rho_{ln}^-$ . Тогда

$$P(x, 0) = \sum_l \sum_n \rho_{ln}^- \psi_l^* \psi_n. \quad (20.36)$$

Для момента выхода ( $t=T$ ) выражение (20.34) указывает на то, что

$$P(x, t) = \sum_l \sum_n e^{i(l-n)\omega T} \rho_{ln}^+ \psi_l^* \psi_n, \quad (20.37)$$

где

$$\left. \begin{aligned} \rho_{ln}^+ &= (1 + \lambda_{ln}) \rho_{ln}^- + \mu_{l-1, n-1} \rho_{l-1, n-1}^-, \\ \lambda_{ln} &= (\beta_l^2 e^{i\Omega_l T} + \alpha_l^2 e^{-i\Omega_l T}) (\beta_n^2 e^{-i\Omega_n T} + \alpha_n^2 e^{i\Omega_n T}) - 1, \\ \mu_{ln} &= 4\alpha_l \beta_l \alpha_n \beta_n \sin \Omega_l T \sin \Omega_n T. \end{aligned} \right\} \quad (20.38)$$

За время прохождения одной молекулы через резонатор фаза каждой величины в выражении (20.37) возрастает со своей характеристической скоростью  $(l-n)\omega$ , а  $\rho_{ln}^-$  заменяется на  $\rho_{ln}^+$ . Если ни одна молекула не проходит через резонатор, то  $\rho_{ln}$  не меняется, однако увеличение фазы продолжается с прежней скоростью. Поэтому можно перейти к воздействию постоянного молекулярного потока, записав

$$P(x, t) = \sum_l \sum_n e^{i(l-n)\omega t} \rho_{ln}(t) \psi_l^* \psi_n. \quad (20.39)$$

Из соотношения (20.38) определим изменение величины  $\rho_{ln}$  при взаимодействии резонатора с одной-единственной возбужденной молекулой:

$$\delta \rho_{ln} = \lambda_{ln} \rho_{ln} + \mu_{l-1, n-1} \rho_{l-1, n-1}. \quad (20.40)$$

Для молекулярного потока  $\Phi$

$$\dot{\rho}_{ln} = \Phi (\lambda_{ln} \rho_{ln} + \mu_{l-1, n-1} \rho_{l-1, n-1}). \quad (20.41)$$

Если из элементов  $\rho_{ln}$  построить квадратную таблицу, то каждая параллельная диагонали линия элементов изменяется независимо в соответствии с (20.41). На самой диагонали, где  $l=n$ , соотношение (20.28) показывает, что

$$-\lambda_{nn} = \mu_{nn} = 4\alpha_n^2 \beta_n^2 \sin^2 \Omega_n T. \quad (20.42)$$

Таким образом,  $\sum_n \dot{\rho}_{nn} = 0$  и след матрицы плотности  $\sum_n \rho_{nn}$ ,

как уже отмечалось, не зависит от времени. Элементы матрицы об-разуют вдоль диагонали сохраняющееся распределение, которое может меняться по форме, но устойчиво стремится к большим  $n$  по мере того, как каждое значение  $\rho_{nn}$  в соответствии с (20.41) приобретает некоторые элементы из распределения, расположенного непосредственно под ним, и переходит в свое собственное распределение, расположенное на уровень выше. Вследствие того что каждая молекула при своем прохождении через резонатор перемещает матричный элемент  $\rho_{nn}$  вверх пропорционально  $\mu_{nn}$ , то эту величину можно интерпретировать как вероятность того, что какая-то молекула выйдет из резонатора невозбужденной.

Недиагональные линии не сохраняют своего распределения: они претерпевают медленное рассеяние. Для того чтобы это показать, достаточно разложить  $\lambda_{ln} + \mu_{ln}$  по степеням  $n-l$  ( $\equiv v$ ), прервав разложение на основных действительном и мнимом членах. После нескольких громоздких выкладок, включающих нахождение про-водных в (20.38), получим

$$\sum_n \dot{\rho}_{n-v, n} = \Phi \sum (\lambda_{n-v, n} + \mu_{n-v, n}) \rho_{n-v, n}$$

и

$$\begin{aligned} \lambda_{n-v, n} + \mu_{n-v, n} &\approx -[\gamma^4 T^2 v^2 / (8\Omega_n^2)] [1 + [\omega_r^2 / (v^2 n \Omega_n^2 T^2)] \sin^2 \Omega_n T] + \\ &+ i [\gamma^2 \omega_r v / (4\Omega_n^3)] [2\Omega_n T - \sin 2\Omega_n T]. \end{aligned} \quad (20.43)$$

Только на диагонали  $v=0$  сумма  $\sum_n \rho_{n-v, n}$  обращается в нуль.

Во всех других местах она отрицательна и убывает со скоростью, зависящей от  $n$  и одновременно пропорциональной  $v^2$ . Опустим обсуждение этого вопроса, а также сдвига частоты, который связан с мнимой частью соотношения (20.43).

Выражение (20.41), описывающее развитие матрицы плотности, было получено для случая возбужденных молекул, поступающих в резонатор. Если вместо этого иметь в виду невозбужденные молекулы, то переход от соотношения (20.28) к (20.29) был бы другим с  $\chi_1$  вместо  $\chi_2$  в (20.28) и соответственно с  $[\alpha_{n-1}(\alpha_{n-1}\chi_1\psi_n + \beta_{n-1}\chi_2\psi_{n-1}) + \beta_{n-1}(\beta_{n-1}\chi_1\psi_n - \alpha_{n-1}\chi_2\psi_{n-1})]$  в (20.29). Обе собственные функции в квадратных скобках имеют частоты  $n\omega \pm \Omega_{n-1}$ . В результате соотношения (20.38) нужно переписать так:

$$\left. \begin{aligned} \rho_{ln}^+ &= (1 + \lambda'_{ln}) \rho_{ln}^- + \mu'_{l+1, m+1} \rho_{l+1, m+1}^-, \\ \text{где} \\ \lambda'_{ln} &= \lambda_{l-1, n-1}^* \text{ и } \mu'_{l+1, m+1} = \mu_{ln}. \end{aligned} \right\} \quad (20.44)$$



Следовательно, (20.41) принимает вид

$$\dot{\rho}_{ln} = \Phi (\lambda'_{ln} \rho_{ln} + \mu'_{l+1, n+1} \rho_{l+1, n+1}). \quad (20.45)$$

Это выражение описывает устойчивую эволюцию распределения вниз к нижним значениям  $l, n$ .

## 20.5. НАГЛЯДНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ

$\sigma$ -Представление — ансамбль классических осцилляторов, который был введен в гл. 13 (см. § 13.9), — легко применить для описания наиболее изменчивой функции  $P(x, t)$  в соотношении (20.39). Если состояние резонатора осталось невозмущенным, т. е. каждая величина  $\rho_{ln}$  постоянна, то вероятность  $P(x, t)$  смещения на величину  $x$  за время  $t$  складывается из синусоидально колеблющихся действительных функций, типичным примером которых является функция

$$\rho_{n-v, n} e^{i\nu\omega t} \psi_{n-v}^* \psi_n + \rho_{n, n-v} e^{-i\nu\omega t} \psi_n^* \psi_{n-v}.$$

Здесь оба слагаемых являются [посредством соотношения (20.35)] комплексно-сопряженными. Данное выражение выявляет некоторую пространственную вариацию  $P$  в зависимости от величины  $x$ , совершающей гармонические колебания на частоте  $\nu\omega$ . Всегда можно найти действительную радиальную плотность  $\sigma(r)$  такую, что двумерное распределение  $\sigma(r) \cos(\nu\theta + \epsilon)$  при спинировании с угловой скоростью  $\omega$  проецируется (как объяснялось в гл. 13) на оси  $x$  и приводит к искомой вероятности  $P(x)$ , совершающей колебания на частоте  $\nu\omega$ . Поэтому любая функция  $P(x, t)$ , описываемая с помощью величин  $\rho_{ln}$ , имеет двойника в виде ансамбля классических осцилляторов, в котором число членов, обнаруженных смещениями на  $x$  за время  $t$ , пропорционально  $P(x, t)$ . Распределение  $\sigma(r, \theta)$  определяет для любого момента времени число осцилляторов с амплитудой  $r$  и фазой  $\theta$ . В невозмущенной системе величина  $\sigma(r, \theta)$  вращается, не изменяясь. Диагональные члены матрицы плотности представляются аксиально-симметричными формами  $\sigma(r, \theta) = \sigma_0(r)$ , тогда как члены на недиагональных линиях, определяемых условием  $l-n = \pm\nu$ , представляются как  $\sigma_\nu(r) \cos(\nu\theta + \epsilon_\nu)$ .

Когерентное состояние в соотношениях (13.16) и (13.18), представленное узким максимумом  $\sigma$ , пробегающим по кольцу, требует некоторого разброса значений  $n$ . В противном случае не выполняется тангенциальное ограничение. В самом деле, из (13.23) известно, что волновая функция изолированного осциллятора в когерентном состоянии с центром  $n_c$  содержит каждую функцию  $\psi_n$  с амплитудой  $a_n$ , которая приблизительно пропорциональна  $e^{-(n-n_c)^2/(4n_c)}$ .

\* Если  $\sigma(r)$  представляет собой функцию Бесселя (Хенкеля) [2]  $H_\nu(k, r)$ , то проекция  $\sigma(r)$  имеет вид  $e^{ikx}$ . Поэтому любую периодическую функцию  $P(x, t)$  можно разложить в ряд Фурье по  $x$  и  $t$ , а амплитуду на частоте  $\nu\omega$  с волновым числом  $k$  можно считать амплитудой соответствующей функции  $H_\nu(k, r)$  для синтезирования искомой функции  $\sigma(r)$ .

(см. § 13.4). Из определения  $A_{nm}$  в соотношении (20.28) ясно, что  $m$  теперь не играет роли и что  $A_{nm}$  — просто амплитуда функции  $\psi_n$ . Матрица плотности превращается в произведение отдельных амплитуд:

$$\rho_{ln} = a_l^* a_n \sim e^{-\Delta^2/(2n_c)}, \quad (20.46)$$

где  $\Delta^2 = (l-n_c)^2 - (n-n_c)^2$ . Когерентное состояние проявляется аксиально-симметричным гауссовским максимумом как в эквивалентном классическом ансамбле, так и в матрице плотности.

Представление  $\rho_{ln}$  в виде произведения (20.46), разумеется, не принадлежит лишь когерентному состоянию, а является характеристическим для любого чистого состояния, т. е. такого состояния, в котором поведение осциллятора можно выразить исключительно через его собственные функции. Когда осциллятор связан с другими системами, он находится в смешанном состоянии, для описания которого необходимы собственные функции всех систем. Только тогда проявляется наиболее общая форма (20.35) для  $\rho_{ln}$ . Из диссипативного характера соотношения (20.43) ясно, что с течением времени связывание неизбежно приведет к тому, что матрица плотности становится более диагональной (причем в этом случае  $\rho_{ln}$  нельзя представить произведением). Соответственно в  $\sigma$ -представлении многие тангенциальные детали стираются. В конце концов, когда матрица плотности оказывается чисто диагональной,  $\sigma$  будет аксиально-симметричным, хотя и могут быть отдельные отклонения при определенных значениях радиуса  $r$ . Такое распределение, в котором осциллятор может иметь четко определенную амплитуду (или энергию), но не иметь предпочтительного значения фазы, нельзя выразить никакой комбинацией волновых функций осциллятора. Однако оно является характерным примером широких возможностей матрицы плотности. Интересно отметить, как связывание квантовых систем ведет к новым (подобным данному) эффектам без незамедлительного отказа от использования классической модели для описания поведения системы. Можно даже обнаружить, что правила, управляющие развитием модели, поддаются визуализации посредством классических представлений. Перейдем к выводу этих правил.

## 20.6. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР С ЗАТУХАНИЕМ

Основные результаты можно продемонстрировать, не прибегая к возбуждению резонатора в связи с самоподдерживающимся действием мазера. Но еще раньше (см. § 16.4 и 18.4) обсуждения диссипативных процессов, хотя и схематично, можно было закончить. Скалли и Лэмб [3] указывали, что поток невозбужденных молекул, проходящий через резонатор, вызывает затухание его колебаний и что этот механизм полностью разработать гораздо легче, чем механизм радиационного затухания, поскольку каждый элемент дис-



сипативного процесса представляет собой скорее двухуровневую систему, чем совокупность мод с ее лестницей уровней, расположенных на равных расстояниях друг от друга. Вовсе не нужно, чтобы молекулы были хорошо настроены на частоту резонатора, поскольку даже при плохой настройке у них есть шанс, хотя и небольшой, выйти из резонатора в возбужденном состоянии\*.

Удобно моделировать потери, используя очень сильные потоки  $\Phi_d$  слабосвязанных молекул. В этом случае флуктуации в потоке можно считать пренебрежимо малыми. Все случайные эффекты, в

\* Описываемый здесь процесс, по-видимому, приводит к нарушению закона сохранения энергии: невозбужденная молекула, частота которой составляет  $\omega_m$  и не равна частоте резонатора  $\omega_0$ , может получить энергию  $\hbar\omega_m$ , в то время как резонатор теряет энергию  $\hbar\omega_0$ . Укрыться за принцип неопределенности, заметив, что переход возможен только если  $|\omega_m - \omega_0|T < 1$ , оказывается недостаточно. Это, может быть, и верно, но остается то обстоятельство, что начальное и конечное состояния молекулы и резонатора можно при желании уподобить малой случайной неопределенности. Чтобы разрешить проблему, необходимо ввести кинетическую энергию поступательного движения молекулы. Эта энергия не остается постоянной во время взаимодействия. Физический механизм, вынуждающий ее изменяться, ведет к пограничному полю на входе и выходе резонатора. Пересекая порог, молекула начинает поляризоваться и градиент поля действует на дипольный момент, вызывая поступательное движение. В свете этого посмотрим, как могла бы быть построена волновая функция стационарного состояния, чтобы с ее помощью можно было описывать полный процесс, включая резонатор и весь путь молекулы от ее входа в резонатор до выхода из него. Вначале молекула и резонатор могли бы быть в четко определенных состояниях, а именно:  $\chi e^{ik_0 x}$  для молекулы и  $\psi_m$  для резонатора. Величина  $e^{ik_0 x}$  описывает начальное поступательное движение. Если полная энергия, включая кинетическую, составляет  $E$ , то волновая функция должна иметь вид  $(\psi_m \chi e^{ik_0 x}) e^{-iEt/\hbar}$ . На входе в резонатор это выражение должно быть согласовано с волновой функцией внутри него, где вследствие взаимодействия соответствующие собственные состояния записываются в виде  $\alpha \chi_1 \psi_n + \beta \chi_2 \psi_{n-1}$  [как в соотношении (18.33)] с возможностью выбора  $\alpha$  и  $\beta$ . Полная волновая функция будет суперпозицией двух данных собственных состояний, каждое из которых умножается на соответствующую ему функцию  $e^{ik_1 x}$  или  $e^{ik_2 x}$ , с тем чтобы дать то же самое значение полной энергии  $E$ . Только тогда построение подойдет для любого момента времени. «Внутренняя» разность энергий  $2\hbar\Omega_n$  компенсирует разность кинетических энергий  $\hbar^2(k_1^2 - k_2^2)/(2m)$  или  $\hbar^2 k_0 \delta k/m$ , если связь слаба. Вследствие различий волновых чисел на выходе из резонатора обе волны будут иметь относительный сдвиг фазы  $L\delta k$  и вне резонатора рекомбинация исходной волновой функции больше не произойдет. Вместо этого возникает смесь исходной функции  $(\psi_m \chi e^{ik_0 x}) e^{-iEt/\hbar}$  и функции  $(\chi_{n-1} \chi_2 e^{ik_0' x}) e^{-iEt/\hbar}$  с  $k_0'$ , отличным от  $k_0$ , для поддержания той же самой энергии  $E$ . Ясно, что если использовать электростатическую линзу для разделения этих двух состояний, то, каким бы путем ни шла данная молекула, она появится на выходе резонатора, имея в точности нужное значение энергии. В конечном итоге, когда в тексте утверждается, что две данные собственные функции в резонаторе претерпевают вследствие различий энергии сдвиг фазы на величину  $2\Omega_n T$ , результирующую вероятность перехода следует приписать различию волновых чисел и записать сдвиг фазы как  $L\delta k$ , т. е.  $2\Omega_n m L/(\hbar k_0)$ . Поскольку скорость молекул составляет  $\hbar k_0/m$ , оба выражения эквивалентны. Таким образом, можно продолжать аргументацию в тексте с уверенностью, что энергия сохраняется, несмотря на кажущееся нарушение закона сохранения энергии.

том числе и тепловые шумы, можно отнести на счет взаимодействия квантуемых систем. Более того, если предположить, что время пребывания  $T$  много меньше  $\tau_e$ , то все ранее обсуждавшиеся проблемы о подходящем значении для  $Q$  исчезают. Предположим, что имеются одинаковые потоки молекул с положительной и отрицательной расстройкой  $\omega_r$ , поэтому мнимая часть в соотношении (20.43) пропадает. В действительной части второе слагаемое в квадратных скобках можно сделать большим путем уменьшения постоянной связи  $\gamma$ . Поэтому только это слагаемое и следует оставить. Учитывая, что для малых  $T \sin(\Omega_n T) \approx \Omega_n T$ , а при большой расстройке  $\Omega_n \approx \omega_r$ , получим

$$\lambda'_{n-v,n} + \mu'_{n-v,n} \approx -\gamma_d^2 T_d^2 v^2 / (8n). \quad (20.47)$$

Здесь обозначения  $\gamma_d$  и  $T_d$  использованы, чтобы отличить постоянные связи и времени пребывания молекул, обладающих затуханием, от аналогичных величин для тех молекул, которые ответственны за усиление в лазере. Когда  $v=0$ , на диагонали матрицы плотности

$$\rho'_{nn} = -\lambda'_{nn} = 4\alpha_{n-1}^2 \beta_{n-1}^2 \sin^2(\omega_r T_d) \approx \gamma_d^2 T_d^2 n, \quad (20.48)$$

как следует из соотношений (20.38), (20.44), (18.38) и (18.36).

Заменив  $\Phi_d \delta_d^2 T_d^2$  на  $B_d$ , проследим за эволюцией матричных элементов  $\rho_{in}$ .

На диагонали из соотношений (20.45) и (20.48) имеем

$$\dot{\rho}_{nn} = B_d [-n\rho_{nn} + (n+1)\rho_{n+1,n+1}]. \quad (20.49)$$

Вне диагонали  $-\lambda_{n-v,n}$  и  $\mu_{n-v,n}$  почти такие же, как и в случае, когда  $v=0$ . Поэтому выражение (20.49) очень неплохо описывает эволюцию  $\rho_{in}$ . Однако существование разности между  $\mu'$  и  $-\lambda'$ , которая меньше любого из них примерно в  $v^2/n^2$  раз, приводит к отклонению от истинной картины, так как в силу (20.45)

$$\begin{aligned} \sum_n \dot{\rho}_{n-v,n} &= \Phi_d \sum_n (\lambda'_{n-v,n} + \mu'_{n-v,n}) \rho_{n-v,n} = \\ &= -\frac{1}{8} B_d v^2 \sum_n \rho_{n-v,n} / n. \end{aligned} \quad (20.50)$$

Разумным представляется узкое (например, с шириной  $n^{1/2}$ ) распределение  $n$ . Оно позволяет вынести эту величину за знак суммы в соотношении (20.50):

$$\sum_n \dot{\rho}_{n-v,n} \approx -[B_d v^2 / (8\bar{n})] \sum_n \rho_{n-v,n}. \quad (20.51)$$

Это выражение показывает, что, в то время как строка матрицы в общем развивается таким же образом, как и диагональ, распределение устойчиво убывает, но не экспоненциально, так как мгновенная постоянная времени изменяется как устойчиво убывающее значение  $\bar{n}$ .



Рассмотрим оба аспекта разложения отдельно: сначала поведение диагональных элементов, а затем поведение недиагональных элементов. Вследствие того что соотношение (20.49) линейно по  $\rho_{nn}$ , любое решение можно синтезировать, если известно разложение одной-единственной величины. Соответствующая функция Грина имеет вид

$$\rho_{rr}(t') = N C_r (e^{t'} - 1)^{N-r} e^{-N t'}. \quad (20.52)$$

Эта функция, как показывает подстановка, удовлетворяет уравнению (20.49), если  $t' = B_d t$ . Чтобы найти начальное состояние, положим  $t' \rightarrow 0$ . Тогда  $\rho_{rr} \rightarrow 0$  для всех  $r$ , за исключением  $r = N$ , для которого  $\rho_{NN} = 1$ . Последующее постоянство суммы  $\sum_r \rho_{rr}$  вытекает из рассмотрения функции  $(1 - e^{-t'})^N [1 + 1/(e^{t'} - 1)]^N$ . Если разложить выражение в квадратных скобках в биномиальный ряд, то видно, что членом с номером  $r$  оказывается  $\rho_{rr}$ . Так как сама функция равна единице, то  $\sum_r \rho_{rr} = 1$ . Подходящее приближение к условию

(20.52) вытекает из применения к нему аппроксимации Стирлинга с последующим разложением в ряд Тейлора:

$$\rho_{rr} \sim N_r e^{-N(r-r_m)^2/(2r_m(N-r_m))}. \quad (20.53)$$

Здесь  $r_m$  определяет положение пика и составляет  $N e^{-t'}$ , а  $N_r$  является зависящим от времени коэффициентом, необходимым для нормировки  $\rho_{rr}$ . Затухание величины  $r_m$ , а следовательно энергии, пропорциональное  $e^{-t'}$ , показывает, что  $t' = t/\tau_e$ , т. е.  $B_d = 1/\tau_e$ . Среднеквадратичная ширина гауссовского пика вытекает из соотношения (20.53) и равна

$$(r - r_m)^2 = r_m(1 - r_m/N) = N e^{-t'}(1 - e^{-t'}). \quad (20.54)$$

По мере того как центр пика со временем экспоненциально опускается от значения  $N$  до нуля, среднеквадратичная ширина увеличивается от нуля до максимального значения  $\frac{1}{2} N^{1/2}$ , при котором

$r_m = \frac{1}{2} N$ , а затем убывает в конечном счете как  $r_m^{1/2}$ . Аппроксимация Стирлинга делает соотношение (20.54) сомнительным при малых  $r_m$ . Однако выражение (20.52) показывает, что (как и ожидалось) процесс завершается приходом системы в основное состояние.

Только что было определено разложение матрицы плотности начиная от чистого собственного состояния  $\psi_N$ . Если бы мы начали с диагонального члена  $\rho_{nn}$  в виде узкого гауссовского пика с центром  $N$  и среднеквадратичным значением ширины  $\omega_0$ ,  $\rho_{nn} \sim e^{-(n-N)^2/(2\omega_0^2)}$ , то каждый элемент  $\rho_{nn}$  развивался бы в соответствии с (20.53). Тогда через время  $t$  распределение центров инерции превратилось бы в пик со среднеквадратичной шириной  $\omega_0 e^{-2t\tau_e}$  с центром в  $N e^{-t\tau_e}$ .

С другой стороны, каждый элемент теперь расплылся бы в пик, ширина которого задается выражением (20.54). В результате воз-

никла бы свертка двух кривых Гаусса. Такая свертка сама по себе представляет собой гауссовскую кривую со среднеквадратичным значением ширины  $\omega$ , которая равна сумме отдельных значений:

$$\omega = \omega_0 e^{-2t'} + N e^{-t'}(1 - e^{-t'}). \quad (20.55)$$

В частности, если начать со значения  $\omega_0 = N$ , то  $\omega = N e^{-t'} = r_m$ . Это означает, что затухание какого-либо распределения (которое было установлено для когерентного состояния осциллятора со среднеквадратичной шириной  $n$ -го распределения, равной самой величине  $n$ ) постоянно поддерживает когерентное состояние.

Этот результат был получен для диагональных элементов  $\rho_{nn}$ , однако он справедлив и для недиагональных. Для проверки подобного утверждения начнем с чисто когерентного состояния, в котором  $\rho_{nn}$  является изотропным гауссовским пиком со среднеквадратичным значением ширины  $N$  и центром в точке  $(NN)$ :

$$\rho_{ln} \sim e^{-l(l-N)^2 + (n-N)^2/(4N)}. \quad (20.56)$$

Вдоль любой недиагональной линии  $l = n - v$  распределение является гауссовским с той же шириной  $N$  и с высотой, уменьшенной множителем  $e^{-v^2/(8N)}$ . Далее, пусть весь этот пик движется вниз к началу координат, оставаясь изотропным и одновременно уменьшаясь по ширине таким образом, что среднеквадратичная ширина всегда равна величине  $n$  в центре. Когда центр достигает значения  $\bar{n}$ , недиагональная часть имеет высоту пика, уменьшенную в  $e^{-v^2/(8\bar{n})}$  раз по сравнению с той, которая была в центре. Чтобы поддержать когерентное состояние, недиагональные элементы должны изменяться таким же образом, как и диагональные, за исключением того, что затухать они будут одновременно. Таким образом, составленная из величин  $\rho_{ln}$  сумма вдоль линии постоянного значения  $v$  (которое постоянно, если  $v = 0$ ) должна удовлетворять условию

$$\sum_n \rho_{n-v,n} \sim e^{-v^2/(8\bar{n})}.$$

Далее, взяв логарифмическую производную, получим

$$\sum_n \dot{\rho}_{n-v,n} = [v^2/(8\bar{n}^2)] \bar{n} \sum_n \rho_{n-v,n} = [-v^2/(8\bar{n}\tau_e)] \sum_n \rho_{n-v,n}, \quad (20.57)$$

поскольку  $\bar{n}$  убывает экспоненциально с постоянной времени  $\tau_e$ . Вновь мы получаем, что  $B_d = 1/\tau_e$ , поэтому соотношения (20.51) и (20.54) идентичны.

Выше было сказано, что когда осциллятор, находящийся в когерентном состоянии, затухает, то остается в когерентном состоянии. Этот результат следует незамедлительно перевести в  $\sigma$ -представление, так как нам уже известно, какое распределение  $\sigma(\mathbf{R})$  описывает когерентное состояние. Оно имеет форму распределения в основном состоянии  $e^{-R^2}$ , где  $\mathbf{R}$  — вектор  $(\xi, \kappa)$ , смещенный, однако, относительно начала координат в новый центр, например в  $\mathbf{R}_0$ , т. е.  $\sigma \sim \exp\{-|\mathbf{R} - \mathbf{R}_0|^2\}$ .



Только что полученный результат показывает, что если допустить затухание когерентного состояния, то распределение остается неизменным по форме и размеру, в то время как его центр  $R_0$  экспоненциально релаксирует назад к началу координат. Вся картина, разумеется, вращается с угловой частотой  $\omega_0$  вокруг начала координат, но это мы приняли за основу. Подобная релаксация характерна для распределения точек, которые совершают упорядоченный дрейф в направлении начала координат со скоростью, пропорциональной смещению, наложенному на диффузионное движение, которое подчиняется закону Фика.

Если концентрация точек составляет  $\sigma(R)$ , то локальный поток  $V$ , определяемый этими процессами, будет составлять  $-\alpha\sigma R = -(D \text{ grad } \sigma)$ . Первое слагаемое обязано своим существованием упорядоченному дрейфу, а второе — диффузии. В стационарном состоянии  $\sigma \sim e^{-\alpha R^2/(2D)}$  при этом повсеместно  $V=0$ . Сдвинем теперь картину к новому центру  $R_0$ . В любой другой точке, определяемой концом вектора  $R$ , скорость упорядоченного дрейфа составляет  $-\alpha R$ , тогда как скорость диффузии направлена от  $R_0$  и имеет значение  $\alpha(R-R_0)$ . Результирующее значение  $V = -\alpha\sigma R_0$ , так что каждая часть  $\sigma$ -распределения движется с одной и той же скоростью  $\alpha R_0$ . Если бы не было случайных элементов, связанных с диссоциацией, то распределение уменьшалось бы в радиусе, так как каждая часть релаксировала бы к началу координат. Однако эффект случайности в механизме диссипации, представленный диффузионной величиной, противодействует этому уменьшению. Угловой разброс распределения, т. е. неопределенность в определении фазы когерентных колебаний, может быть очень малым, например порядка  $\bar{n}^{1/2}$ , когда  $\bar{n}$  велико. Очевидно, однако, что он увеличивается, поскольку диссипация направляет распределение к началу координат. В результате распределение вокруг начала координат оказывается изотропным, а информация, касающаяся фазы, теряется. Сказанное выше представляет собой качественное описание поведения недиагональных элементов  $\rho_{ln}$ .

Только что мы рассмотрели специальный случай диффузионного эффекта, но, возвращаясь к  $\rho_{ln}$  и помня, что каждая строка  $l = n-v$  развивается независимо от других, можно распространить сказанное на общий случай.

Последующее изложение мы проведем лишь в общих чертах; подробности преобразований опустим. Рассмотрим одну строку. Ее вклад в  $P(\xi, t)$ , согласно выражению (20.39), можно записать так:

$$P_v(\xi, t) = \sum_n \rho_{n-v, n} \Psi_{n-v}^* \Psi_n. \quad (20.58)$$

Будем считать  $\psi_n$  действительным и пренебрежем колебательным множителем, что равноценно пренебрежению вращением  $\sigma$ -распределения. Функции  $\psi_n$  удобно записать через полиномы Эрмита, как это делалось в выражении (13.3):

$$\psi_n = \pi^{-1/4} (2^n n!)^{-1/2} H_n(\xi) e^{-1/2\xi^2}.$$

Воспользуемся следующими свойствами полиномов Эрмита [4]:

$$\left. \begin{aligned} dH_n/d\xi &= 2nH_{n-1} \text{ и} \\ d^2H_n/d\xi^2 &= 4n\xi H_{n-1} - 2nH_n. \end{aligned} \right\} \quad (20.59)$$

Тогда из соотношений (20.58) и (20.45) имеем

$$\partial P_v / \partial t = \Phi_d \sum_n \rho_{n-v, n} (\lambda_{n-v, n}' \psi_{n-v} \psi_n + \mu_{n-v, n}' \psi_{n-v-1} \psi_{n-1}).$$

Кроме того, рассуждение, приводящее к выражению (20.48), можно применить и здесь, чтобы показать, что

$$\Phi_d \lambda_{n-v, n}' = -(n - 1/2v) B_d = -(n - 1/2v) / \tau_e \text{ и}$$

$$\Phi_d \mu_{n-v, n}' = [n(n-v)]^{1/2} / \tau_e.$$

Получив эту информацию, читатель может убедиться, что

$$\partial^2 P_n / \partial \xi^2 + 2\partial(P, \xi) / \partial \xi = 4\tau_e \partial P_v / \partial t \quad (20.60)$$

и не зависит от  $v$ . Поэтому выражение справедливо для любой функции  $P(\xi, t)$ .

Поскольку это уравнение продолжает оставаться справедливым по мере вращения  $\sigma$ -распределения и поскольку  $P$  представляет собой проекцию  $\sigma$  на ось  $\xi$ , соотношение (20.60) должно представлять одну компоненту разложения  $\sigma$ , что позволяет записать

$$D\nabla^2\sigma + 2D \text{ div}(\sigma R) = \partial\sigma / \partial t. \quad (20.61)$$

Здесь  $D = 1/4\tau_e = \omega_0 / (4Q_r)$ . Левая часть равенства представляет собой дивергенцию потока вектора  $-D \text{ grad } \sigma + \sigma R / (2\tau_e)$ . Второе слагаемое описывает экспоненциальное затухание индивидуальных векторов с постоянной времени  $2\tau_e$ , т. е.  $\tau_a$ .

Этот результат выглядит на редкость классическим. Если рассматривать  $\sigma(R)$  как представление ансамбля реальных классических вибраторов, находящихся под действием линейных диссипативных сил и случайного шума, то последний вынуждает каждую точку распределения совершать беспорядочное движение, которое статистически описывается коэффициентом диффузии. Подобное уравнение движения для  $\sigma$  совпадает с уравнением (20.61), и величина шума определяет  $D$ . Если шум является тепловым, то ансамбль в конце концов придет к больцмановскому распределению  $\sigma \sim e^{-R^2/(2\omega)}$ , где  $\omega$  выбирается так, чтобы средняя потенциальная энергия была равна  $1/2 k_B T$ . В соответствии с выражением (13.11) средняя потенциальная энергия равна  $1/2 \hbar \omega_0 \bar{\xi}^2$ , т. е.  $1/2 \hbar \omega_0 \omega$ . Поэтому

$$\sigma \sim e^{-R^2 \hbar \omega_0 / (2k_B T)}.$$

В случае квантового вибратора, изолированного от теплового шума, окончательное распределение будет иметь вид  $e^{-R^2}$ , вследствие чего собственный квантовый шум производит тот же эффект, как если бы вибратор был классическим и подвергался воздей-



вию шума от источника с температурой  $\hbar\omega_0/(2k_B)$ . Будь потери вызваны лишь излучением, можно было бы не удержаться перед искушением приписать этот шум (см. § 16.5) нулевому движению мод резонатора, каждая из которых имеет среднюю энергию  $\hbar\omega_0/2$ . Однако в модели механизма потерь нет ничего, явно аналогичного нулевому движению, приводящему к данному результату. Поэтому более разумнее устоять перед искушением истолковать нулевую энергию с помощью классических представлений.

Существование квантового шума обнаруживает ограниченность диэлектрической модели, которая во всех других отношениях работает прекрасно. Ее недостаток во многом оказывается тем же, что и уже отмеченный ранее при попытках распространить классические представления слишком далеко, а именно диэлектрическая модель рассматривает две взаимодействующие системы (резонатор и молекулу) как независимые объекты, каждый из которых подвергается воздействию силы со стороны другого (см. § 13.10 и 18.4). Таким образом, молекулы откликаются на строго определенное поле резонатора и, аналогично, резонатор откликается на строго определенные колебания поляризации молекул. По аналогии с приведенными ранее примерами, можно ожидать, что, рассматривая связанные системы под соответствующим квантовым углом зрения, можно выявить новые статистические черты. Так было с флуктуацией амплитуды и фазы, которая появилась независимо от каких-либо внешних причин.

Следует помнить, что температура шумов, полученная здесь, относится только к идеально холодным системам, потому что все молекулы, ответственные за диссипацию, не возбуждены. Резонатор с большим затуханием при температуре стенок  $T_0$  можно имитировать потоком нерезонансных молекул, причем величина потока невозбужденных молекул составляет

$$\Phi_d e^{\hbar\omega_0/(k_B T_0)} / (e^{\hbar\omega_0/(k_B T_0)} - 1),$$

а возбужденных —  $\Phi_d / (e^{\hbar\omega_0/(k_B T_0)} - 1)$ . Имеется суммарный избыток  $\Phi_d$  невозбужденных молекул, который обуславливает требуемую диссипацию. Отношение обоих потоков равно коэффициенту Больцмана для температуры  $T_0$ . Все молекулы в равной мере участвуют в флуктуациях, вследствие чего они возрастают пропорционально полному потоку  $\Phi_d \coth[\hbar\omega_0/(2k_B T_0)]$ , так что температура эквивалентного шума  $T_N$  принимает вид

$$k_B T_N = \frac{1}{2} \hbar\omega_0 \coth[\hbar\omega_0/(2k_B T_0)]. \quad (20.62)$$

При низких температурах остаточный шум является чисто квантовым со значением  $T_N = \hbar\omega_0/(2k_B)$ , которое с ростом температуры возрастает до  $T_N = T_0$ . В этом случае шум можно считать полностью тепловым и соответствующим из классических соображений ожидаемым размерам (сравнимым с шумом Джонсона) (см. § 6.5).

Форма соотношения (20.62) не противоречит формуле Планка

для средней энергии гармонического вибратора с добавленной нулевой энергией, а переход от квантового низкотемпературного шума к высокотемпературному классическому шуму в точности совпадает с переходом от нулевой энергии вибратора к классическому результату с равномерным распределением. При любой температуре равновесная форма  $\sigma$ -распределения является гауссовской формой со средней энергией  $k_B T_N$ , что в точности совпадает с результатом Планка. Приятно, хотя и только для специального случая, найти подтверждение точке зрения, развитой в гл. 15, о том, что при взаимодействии квантовых систем хаотичность передается и устанавливается статистическое равновесие.

В заключение отметим, что когда вибратор подвергается воздействию определенной силы, то отклик эквивалентного классического ансамбля в точности такой же, как и описанный в гл. 13, когда каждый член ансамбля откликается независимо от остальных. Поэтому можно полностью пересказать развитие функции  $P(\xi, t)$  для квантового вибратора, на который действует определенная сила и который подвергается диссипации из-за идеально холодных поглотителей;  $P(\xi, t)$  представляет собой проекцию на ось  $\xi$  двумерного распределения  $\sigma(\mathbf{R}, t)$ , которое развивается в соответствии с выражением (20.61); вращается вокруг начала координат с угловой скоростью  $\omega_0$  и в этом вращающемся состоянии смещается силой  $F(t)$ , которая вызывает поступательный сдвиг ансамбля всегда в направлении  $\kappa$  со скоростью  $\kappa = F(m\hbar\omega_0)^{1/2}$ . В лабораторных координатах, записав  $x$  и  $\dot{x}/\omega_0$  вместо  $\xi$  и  $\kappa$ , можно соотношению (20.61) придать форму:

$$\dot{\sigma} = [\hbar/(4mQ_r)] \nabla^2 \sigma + [\omega_0/(2Q_r)] \operatorname{div}(\sigma \mathbf{r}). \quad (20.63)$$

Любая приложенная сила  $F(t)$  сдвигает вращающееся  $\sigma$ -распределение целиком в направлении  $y$  со скоростью  $\dot{y} = F/(m\omega_0)$ . Проекция распределения на ось  $x$  дает функцию  $P(x, t)$ .

Стоит отметить то обстоятельство, что, когда  $Q_r$  велико, а силу  $F$ , приложенную на резонансной частоте, можно разложить на две вращающиеся компоненты величиной  $F/2$  каждая, одна из компонент синхронна с вращением  $\sigma$ -распределения, а другая — с противоположным вращением — вызывает лишь малые возмущения и может не учитываться. Поэтому во вращающейся системе отсчета распределение претерпевает устойчивый дрейф в постоянном направлении со скоростью  $F/(2m\omega_0)$ . Это добавляет величину  $[-F/(2m\omega_0)] \operatorname{grad} \sigma$  в правую часть соотношения (20.63), что равноценно замене второго члена в этом уравнении на  $[\omega_0/(2Q_r)] \operatorname{div} \times [\sigma(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)]$ , где  $\mathbf{r}_0 = Q_r F/(m\omega_0^2)$  представляет собой классическое значение амплитуды в резонансном пике. Устойчивое состояние в этом случае представляет собой гауссовский пик с шириной, соответствующей температуре, смещенный как целое от начала координат. Если же  $k_B T_0 \ll \hbar\omega_0$ , то возникает строго когерентное состояние, которое выглядит более естественным, чем можно было бы ожидать при рассмотрении.



## 20.7. ДИССИПАЦИЯ И ФЛУКТУАЦИИ В МАЗЕРЕ

Общие идеи, изложенные в предыдущем параграфе, сразу можно распространить и на спонтанно осциллирующий мазер, в котором независимо происходят два процесса: регенеративное действие возбужденных, хорошо настроенных молекул и диссипативное действие ненастроенных и невозбужденных молекул. Возбужденные молекулы в соответствии с (20.41) вызывают рост  $\rho_{ln}$ , в то время как невозбужденные в соответствии с (20.49) препятствуют ему. Оба процесса, действуя совместно, объединяются в одном уравнении для диагональных величин:

$$d\rho_{nn}/dt' = -C_n \rho_{nn} + C_{n-1} \rho_{n-1, n-1} - n \rho_{nn} + (n+1) \rho_{n+1, n+1}. \quad (20.64)$$

Здесь, как и прежде,  $t' = t/\tau_e$ , а  $C_n = \tau_e \Phi_{nn}$  — число молекул, перешедших быть возбужденными в течение времени  $\tau_e$ . Из соотношения (20.38) имеем

$$C_n = \tau_e \Phi \gamma^2 (n+1) \sin^2 \Omega_n T / \Omega_n^2. \quad (20.65)$$

Скорость возрастания определяется величиной  $C_n$ , смысл которой в основном совпадает с отрицательной потерей  $-\kappa_e''$  в диэлектрической трактовке. При малых значениях  $n$  имеем  $C_n \sim n$  и возбужденные молекулы откликаются на воздействие поля резонатора линейно. Критический поток, при котором начинается действие мазера, таков, что  $C_n = n$  при малых  $n$ . Поэтому действия первой и второй пар величин в выражении (20.64) оказываются равными, но противоположными. Следовательно, в соответствии с выражением (20.7)  $\Phi_e = 1/(\tau_e \gamma^2 T^2)$ . Бессмысленно искать точной связи изменения  $C_n$  в зависимости от значения  $n$ , потому что она определяется не известным нам разбросом времен пребывания молекул в резонаторе. Достаточно лишь положить, что ее начальная пропорциональность  $n$  нарушается и  $C_n$  в конечном счете достигает максимума и даже проходит через него. Устойчивое состояние колебаний находится возле того значения  $n$ , для которого  $C_n = n$ .

Однако, прежде чем обсуждать устойчивое колебательное состояние, рассмотрим ситуацию перед началом работы мазера и тотчас после того, как  $E$  превысит единицу\*. До тех пор, пока преобладает линейность, т. е. пока  $C_n = F_n$  и  $F$  постоянно, последовательность действий, с помощью которых мы пришли от выражения (20.45) к соотношениям (20.60) и (20.61), также применима к выражению (20.64). Это позволяет описать поведение  $\sigma(R)$  с помощью дифференциального уравнения

$$\frac{1+F}{4\tau_e} \nabla^2 \sigma + \frac{1-F}{2\tau_e} \operatorname{div}(\sigma R) = \frac{d\sigma}{dt}. \quad (20.66)$$

\* Следует помнить, что в этом случае модель перестает быть реальной, так как в реальном мазере скорость роста ограничена скоростью  $T$ , а не  $\tau_e$ . Но картину происходящего вряд ли можно представить в отрыве от временного масштаба, в любом случае ее рассматривают в первую очередь для того, чтобы показать некоторую ограниченность  $\sigma$ -представления.

Дрейф назад к началу координат теперь определяется постоянной времени  $2\tau_e/(1-F)$ , которая ясно определяет противодействие диссипативного и регенерационного процессов, сбалансированных при  $F=1$ . С другой стороны, диффузионный процесс, как следует из вида дополнительного множителя  $1+F$ , объединяет в себе оба процесса. Если  $F < 1$ , то устойчивое состояние имеет гауссовскую форму основного состояния осциллятора с центром в начале координат, включающую множитель  $[(1+F)/(1-F)]^{1/2}$ :

$$\sigma \sim e^{-R^2/(2w)}; \quad w = \frac{1}{2}(1+F)/(1-F). \quad (20.67)$$

Когда  $F$  становится больше единицы, распределение распадается:

$$\left. \begin{aligned} \sigma &\sim w^{-1} e^{-R^2/(2w)}, \\ w(t) &= w_0 e^{(F-1)t/\tau_e} - 1/2(F+1)/(F-1). \end{aligned} \right\} \quad (20.68)$$

До тех пор, пока  $C_n = F_n$ , экспоненциальный разброс распределения сохраняется, но максимум  $\sigma$  остается в начале координат. Однако по мере возрастания  $n$   $C_n$  растет менее быстро, чем  $n$ , и внешние области  $\sigma$  меняются медленнее, тогда как во внутренних областях разброс сохраняется. В конце концов, когда снаружи  $C_n \sim n$ , ведущий край останавливается и внутренние области нагромождаются возле него до тех пор, пока для устойчивого состояния  $\sigma$  не принимает форму кольца.

В этом месте обнаруживается уязвимость  $\sigma$ -представления. Вывод соотношения (20.66) из выражения (20.64) основан на применимости линейной аппроксимации. Как только  $C_n$  перестает быть пропорциональным  $n$ , уже нельзя исключить  $n$  при выводе дифференциального уравнения для  $\sigma$ . Это не означает, что соотношение (20.66) нужно полностью отвергнуть. С ним просто нужно обращаться осторожно, как с наиболее подходящей аппроксимацией, с надеждой, что возможность варьировать коэффициентами в зависимости от  $R$  приведет к необходимым упрощениям. Позднее мы покажем, что решение для устойчивого состояния действительно совместимо с медленно меняющимся дрейфом и с коэффициентами диффузии. Однако мы установили также, что тангенциальное и радиальное изменения распределения вызваны разными коэффициентами диффузии.

Чтобы обсудить сначала радиальное изменение, достаточно заметить, что в стационарном состоянии  $\rho_{ln}$  являются диагональными элементами и определяются соотношением (20.64). Введем  $\bar{n}$  как  $\sum_n n \rho_{nn}$ . Тогда

$$d\bar{n}/dt' = \sum_n n d\rho_{nn}/dt' = \sum_n (C_n - n) \rho_{nn} = \bar{C}_n - \bar{n}. \quad (20.69)$$

Для узкого распределения стационарного состояния  $\bar{n} = n_0$ , а  $C_n(n_0) = n_0$ . Пусть поблизости от  $n_0$  имеем  $C_n = n_0 - C'_n(n - n_0)$ , где



положительное  $C'_n = -dC_n/dn$  при  $n=n_0$ . Тогда соотношение (20.69) можно переписать так:

$$d\bar{n}/dt' = (n_0 - \bar{n})(1 + C'_n). \quad (20.70)$$

Это выражение показывает, что  $\bar{n}$  приближается к  $n_0$  экспоненциально с постоянной времени  $\tau_e/(1+C'_n)$ . Вводя  $Q_{sat}$ , имеем

$$Q_{sat}/Q_r = 1/(1 + C'_n). \quad (20.71)$$

То же самое значение  $Q_{sat}$  определяет разброс значений  $n$  в стационарном состоянии. Если  $d\rho_{nn}/dt' = 0$  и  $\rho_{nn}$  разложить в ряд Тейлора по  $n_0$ , то выражение (20.64) принимает вид

$$(1 - C'_n)(\rho_{nn} + y\rho'_{nn}) + n_0\rho''_{nn} = 0, \text{ где } y = n - n_0.$$

Как обычно, решением является гауссиан  $\rho \sim e^{-y/(2w)}$  и  $w = n_0/(1 + C'_n)$ . Среднеквадратичное значение ширины равно  $n_0 Q_{sat}/Q_r$ .

Переведем это на язык  $\sigma$ -распределения  $(2n_0)^{1/2}$ . Каждая величина в  $\rho_{nn}$  представляется аксиально-симметричным распределением, которое было бы идеально острым пиком в точке  $(2n)^{1/2}$ , если бы  $\psi_n^2(\xi)$  в точности совпадало с классической вероятностью. Однако уже было показано, что пик не является идеально острым и внутри него имеется последовательность вторичных колец, поочередно положительных и отрицательных. Если теперь добавить все, что связано с  $\psi_n^2 \sim n_0^{1/2}$ , то радиус этих пиков превысит примерно

в  $n^{1/6}$  наибольшее разделение вторичных колец (например, в 10 раз для  $n=10^6$ ). Этого, во-первых, достаточно для того, чтобы убедиться, что вторичные колебания гасят друг друга; во-вторых, мы видим, что результирующий пик достаточно широк по сравнению с отдельными составляющими (и их ширина не играет существенной роли). Это означает, например, что кольцо в  $\sigma$ -представлении очень близко отражает распределение  $\rho_{nn}$ . Вследствие того, что каждое значение  $n$  соответствует пику радиуса  $R = (2n)^{1/2}$ , диапазон значений  $\Delta n$  преобразуется в диапазон  $\Delta R = \Delta n/(2n)^{1/2}$ , и если  $\overline{\Delta n^2} = n_0/(1 - C'_n)$ , то  $\overline{\Delta R^2} = 1/[2(1 + C'_n)]$ , что составляет среднеквадратичную ширину когерентного состояния  $1/r$ , увеличенную множителем  $Q_{sat}/Q_r$ .

Все сказанное является хорошим приближением к решению уравнения (20.64) в устойчивом состоянии. Посмотрим, какие коэффициенты дрейфа и диффузии необходимы для такого приближения. С этой целью вернемся к выражению (20.64). Если бы существовали только два последних слагаемых, то колебание затухало бы экспоненциально и  $\sigma$ -распределение релаксировало с локальной скоростью  $-R/\tau_a$  к началу координат. Добавление усиливающих величин уменьшает локальную скорость в  $(n - C_n)/n$  раз, что, разумеется, приводит к ее обращению в нуль при  $n=n_0$ . В той окрестности  $n_0$ , для которой  $C_n = n_0 - C'_n(n - n_0)$ , скорость дрейфа составляет  $-R_0(1 + C'_n)(n - n_0)/(n_0\tau_a)$  или  $-2(1 - C'_n)(R - R_0)/\tau_a$ ,

так как  $n \sim R^2$ . Поток в  $\sigma$  раз больше этой величины и представляет собой дрейф распределения в направлении к  $R_0$  как сверху, так и снизу. Ему противодействует диффузия, вызванная беспорядочным шумом. Если  $\sigma \sim \exp[-(R - R_0)^2/(2w)]$ , то диффузионный поток  $-Dd\sigma/dR$  равен  $(R - R_0)D\sigma/w$ , т. е.  $2(1 + C'_n)(R - R_0)D\sigma$  для  $w = 1/[2(1 + C'_n)]$ , как было получено ранее. В стационарном состоянии потоки должны уравниваться и поэтому  $D$  должно принять значение  $1/\tau_a$  или  $1/(2\tau_e)$ , что вдвое превышает соответствующее значение для свободного вибратора. Если не приписывать шум внезапным импульсам, возникающим при каждом переносе кванта, то в стационарном состоянии число квантов, переданных молекулами резонатору, должно быть равно числу устраненных квантов. Или, если иметь в виду шум, то эффективное значение  $F$  в окрестности стационарного состояния всегда равно единице.

Было бы неправильно рассматривать данную интерпретацию иначе, чем просто удобный прием. В квантовой механике нет ничего, что могло бы оправдать квазиклассическую концепцию внезапных включений состояния, вызывающих острые импульсы. Тем не менее эта концепция работает так же, как и классическое моделирование, которому придавалось столь большое значение, а значит, эти идеи можно использовать для решения различных задач. При этом не стоит обольщаться тем, что эти идеи описывают реально наблюдаемые явления в том случае, когда наша интуиция настолько тонка, что мы можем проследить все процессы. А это как раз и выводит нас на коварный путь, ведущий к скрытым интерпретациям квантовой механики, которые до сих пор не внесли ничего полезного в прогрессивное развитие физики.

Для оценки фазовой диффузии, вызванной квантовым шумом, несохранившиеся недиагональные элементы  $\rho_{in}$  [например, в соотношении (20.43)] необходимо перевести в выражение для коэффициента диффузии. Рассмотрим в  $\sigma$ -представлении узкое кольцо радиусом  $R$ , вокруг которого  $\sigma$  произвольно меняется. В разложении Фурье этого изменения фазовый множитель  $e^{ivs}$  имеет вид  $e^{ivs/R}$ , если  $s$  измеряется по периметру кольца. В результате диффузии такое изменение затухает экспоненциально в соответствии с уравнением

$$D\partial^2\sigma/\partial s^2 = \partial\sigma/\partial t,$$

которому удовлетворяет  $\sigma \sim \exp[ivs/R - Dv^2t/R^2]$ . Постоянная времени равна  $R^2/(Dv^2)$ . Она изменяется как  $1/v^2$  — в точности так, как предсказывает действительная часть выражения (20.43). Соопоставление обоих выражений показывает, что когда система настроена идеально и  $\Omega_n^2 = v^2(n + 1)$ , то

$$D = \frac{\Phi v^2 T^2 R^2}{8(n + 1)} = \frac{1}{4} \Phi v^2 T^2 = \frac{F}{4\tau_e} \quad (20.72)$$

[см. (20.7)]. Величина  $D$  является коэффициентом тангенциальной диффузии, вызываемой исключительно невозбужденными молекулами.



К невозбужденным молекулам применяется несколько другой подход. Они дают в выражении (20.57) постоянную времени, равную  $8\pi\tau_e/v^2$ , т. е.  $4R^2\tau_e/v^2$ , эквивалентную значению  $D=1/4\tau_e$ . Диффузионные процессы независимы и вносят вклад одного и того же знака в действительную часть соотношения (20.43). Результирующий коэффициент тангенциальной диффузии равен  $(1+F)/(4\tau_e)$ . Он одинаков для обоих типов диффузии — как для радиальной, так и для тангенциальной на начальном этапе их роста соответственно выражению (20.66).

До сих пор, однако, ничего не было сказано о том, что  $n$  мало и что в противоположность радиальной диффузии коэффициент тангенциальной диффузии не уменьшается при приближении к стационарному состоянию. Именно поэтому необходимо осторожное обращение с  $\sigma$ -представлением. Мы получаем отличную общую картину действительно квантового поведения, но то тут, то там нам приходится решать вопрос о целесообразности применения такого представления для количественных оценок. А этого достаточно, чтобы вызвать скептическое отношение к глубине выводов, вытекающих из всей модели.

## 20.8. ИЗМЕРЕНИЕ ЧАСТОТЫ МАЗЕРА

При подключении мазера к прибору для измерения его частоты последний откликается каждый раз, когда сигнал на его входе проходит через нулевое значение. Акт отклика указывает наблюдателю, например, что в некоторый момент (хорошо определенный по отношению к периоду колебаний)  $E=0$ . Обладая этой информацией, наблюдатель должен запустить волновой пакет  $\sigma(\xi, \kappa)$  с отчетливо выраженным пиком. До тех пор, пока наблюдатель довольствуется неконтролируемой работой мазера и счетчика, его способность предсказать фазу в более поздний момент ограничена разбросом  $\sigma$ -пика вокруг кольца. Предположим, что среднеквадратичное значение угловой ширины пика увеличилось до  $2\Delta\theta$ . Это значение есть мера неопределенности фазы колебаний для наблюдателя, который наконец регистрирует отклик счетчика. Разброс  $\pm\Delta\theta$  предполагает, что счетчик может откликнуться в любой момент времени внутри интервала  $\pm\Delta\theta/\omega_0$ . Следовательно, возникает неопределенность  $\Delta\theta/(\omega_0 t)$  частоты, регистрируемой наблюдателем. Если среднеквадратичная неопределенность частоты, измеренная подсчетом числа периодов за время  $t$ , составляет  $\Delta\omega_0$ , то

$$\Delta\omega_0/\omega_0 = \Delta\theta/(\omega_0 t). \quad (20.73)$$

Тангенциальная диффузия приводит к гауссовскому распределению  $e^{-s^2/(4D)}$  с  $\Delta s = (2Dt)^{1/2}$ . Поэтому  $\Delta\theta = (2Dt)^{1/2}/R = (Dt/\bar{n})^{1/2}$  и

$$\Delta\omega_0/\omega_0 = [D/(\bar{n}\omega_0^2 t)]^{1/2}. \quad (20.74)$$

Этот результат будет обсуждаться в следующем параграфе. Сначала же следует привлечь внимание к предмету, который до

сих пор игнорировался, а именно к мнимой величине в соотношении (20.43), обращающейся в нуль в случае идеально настроенного мазера. Если  $\omega_r \neq 0$ , то каждая возбужденная молекула вызывает сдвиг фазы внедиагональных величин  $\rho_{ln}$ , пропорциональный  $v$ , а поток молекул увеличивает скорость сдвига фазы в  $\Phi$  раз. Это равносильно изменению угловой скорости вращения  $\sigma$ -представления. Данное изменение создаст кратное  $v$  изменение в частоте колебаний проекции на ось  $\xi$  в Фурье-компоненте  $v$ . Самосогласованность требует, чтобы  $\omega$  — результирующая частота в стационарном состоянии — была такой, при которой сдвиг от значения  $\omega_0$ , составляющий  $2(\omega_e - \omega_r)$ , задавался выражением (20.43). Тогда

$$2(\omega_e - \omega_r) = [\Phi v^2 \omega_r / (4\Omega_n^3)] [2\Omega_n T - \sin(2\Omega_n T)],$$

откуда

$$\omega_r/\omega_e = \{1 + [\Phi v^2 / (8\Omega_n^3)] [2\Omega_n T - \sin(2\Omega_n T)]\}^{-1}.$$

За исключением различий в обозначениях, эта формула совпадает с соотношением (20.11). Диэлектрическая модель молекулярного луча оказывается удовлетворительной как в отношении контроля частоты, так и в отношении процесса усиления. Только в вопросе о флуктуациях она не годится.

## 20.9. МАЗЕР КАК СТАНДАРТ ЧАСТОТЫ

Стандарт частоты, по существу, представляет собой осциллятор, частота колебаний которого, насколько это возможно, мало подвергается возмущениям как со стороны внутренних, так и внешних причин. Маятниковые часы ограничены в постоянстве показаний изменениями длины маятника (температура, износ опоры), значением  $g$  (если их перемещают в другое место) и изменениями в амплитуде колебаний. Электрические осцилляторы (например, совершающие вынужденные колебания вибраторы с кварцевыми кристаллами) в одинаковой степени подвержены влиянию температурных изменений и дрейфу компонент в поддерживающих контурах. Помимо этих эффектов, которые можно свести к минимуму подбором хорошей схемы и специальных режимов, существует собственное ограничение, связанное с дрейфом фазы вследствие внутренних шумов. В гл. 11 отмечалось, что осциллятор с обратной связью испытывает случайные блуждания фазы  $\theta$ . Из модифицированного соотношения (11.44) через время  $t$  получаем

$$\Delta\theta = [t/(2\pi I_\omega)]^{1/2}/(\omega_0 L q_0),$$

где  $I_\omega$  — спектральная интенсивность флуктуации в контуре (см. § 4.5). Если эти флуктуации вызваны джонсовскими шумами в резисторах, то при температуре  $T_0$  из соотношения (6.49) имеем  $I_\omega = 2Rk_B T_0/\pi$  и

$$\Delta\theta = [k_B T_0 t / (E \tau_e)]^{1/2} \quad \Delta\omega_0/\omega_0 = [k_B T_0 / (P t)]^{1/2} / Q_r. \quad (20.75)$$



Здесь  $E$  — энергия колебаний, равная  $q_0^2/(2C)$ , а  $P$  — рассеиваемая мощность, равная  $E/\tau_e$ , где  $\tau_e = L/R$ .

Чтобы применить все это к мазеру, рассмотрим сначала соотношение (20.72) выражению для коэффициента диффузии. Он, как и в (20.61), только усиливает диссипативный вклад множителем  $F+1$  так, что эквивалентная температура шумов составляет  $\frac{1}{2}(F+1)\hbar\omega_0/k_B$ . Эта величина все еще меньше комнатной температуры, если только  $F$  невелико. Говоря так, мы должны быть уверены, как и в предыдущих дискуссиях, что буферное действие молекул связано как с квантовым, так и с тепловым шумами. Вывод состоит в том, что единственным источником, достойным рассмотрения, является тепловой шум. Величина  $D$ , вместо того чтобы составлять  $\frac{1}{4}\tau_e$ , равна  $[2k_B T_0/(\hbar\omega_0)]/(4\tau_e)$ , т. е.  $k_B T_0/(2\hbar Q_m)$  в отсутствие буферного действия. Однако из-за того, что каждое перемещение в беспорядочном блуждании вызвано шумом и уменьшено в  $\tau_e/T$  раз, а также из-за того, что  $D$  пропорционально квадрату длины пробега, имеем

$$D = k_B T_0 Q_m / (2\hbar Q_m^2), \quad (20.76)$$

и из соотношения (20.74) получаем

$$\Delta\omega_0/\omega_0 \sim [k_B T_0 Q_m / (2Q_m^2 E \omega_0 t)]^{1/2} \sim [k_B T_0 / (2Pt)]^{1/2} / Q_m. \quad (20.77)$$

Приближенность этих соотношений связана с тем, что связь  $T$  и  $Q_m$  осуществлялась не слишком тщательно и при более скупудном рассмотрении может появиться множитель порядка единицы.

В мазере на аммиаке время пребывания составляет примерно  $10^{-4}$  с, а  $Q_m$  — примерно  $10^7$ . Поток из  $10^{13}$  молекул в секунду соответствует мощности около  $10^{-10}$  Вт, что составляет верхний предел для  $P$ . Тогда если  $T_0 = 300$  К, то  $\Delta\omega_0/\omega_0 \sim 5 \cdot 10^{-13}/t^{1/2}$  (где  $t$  выражено в секундах). За 10 с в мазере совершается  $2,4 \cdot 10^{11}$  периодов колебаний и неопределенность частоты составляет примерно  $2 \cdot 10^{13}$ , что эквивалентно неопределенности фазы в  $\frac{1}{20}$  периода, т. е. около  $20^\circ$ . Это очень хороший результат, однако водородный мазер работает еще лучше.

В водородном мазере используют переход в атомарном водороде, при котором спины электрона и протона оказываются взаимосвязанными. Обе частицы, имея спин, равный  $\frac{1}{2}$ , связываются и дают либо триплетное состояние с параллельными спинами, либо синглетное — с антипараллельными. Первому состоянию соответствует большая энергия. Разность энергий соответствует частоте 1,42 ГГц — знаменитой 21-сантиметровой линии, сыгравшей ключевую роль в радиоастрономических исследованиях галактики.

Магнитное поле расщепляет триплет (рис. 20.4, а) на зеемановские компоненты. Однако, для того чтобы разрушить связь, не требуется очень сильного поля — в правой части рисунка процесс почти завершился. Для нашего обсуждения детали не важны. Существенным является то, что два верхних состояния ( $F=1$ ,  $M_F=0$  и 1), энергия которых возрастает с ростом напряженности поля,

можно сфокусировать магнитной линзой (рис. 20.4, б), подобной электростатической линзе в лазере на аммиаке, в то время как два нижних состояния оказываются расфокусированными. Таким образом, указанный переход можно использовать для стимулирования колебаний резонатора, увеличивая таким способом заселенность уровней возбужденного состояния. Специфичным для данного прибора является то, что пучок атомов проходит не непосредственно через резонатор, а через кварцевый баллон с тефлоновой прокладкой, в которой направления движения атомов беспорядочно изменяются до тех пор, пока они не выйдут из нее. Тогда их и подхватывают вакуумные насосы.

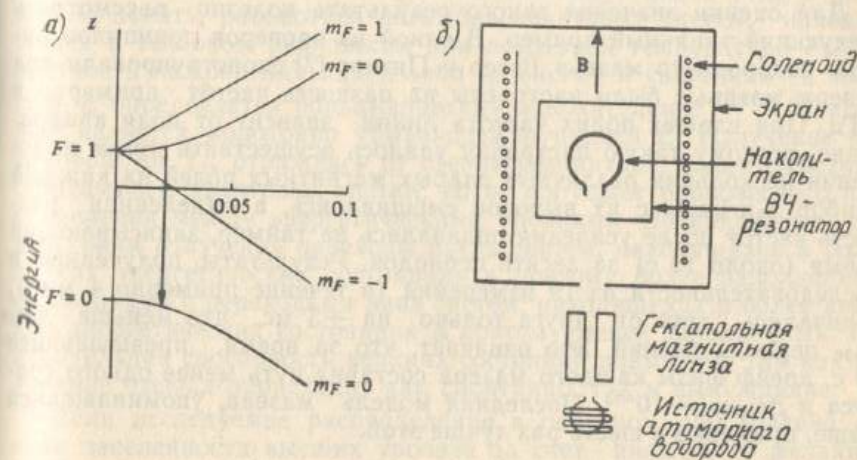


Рис. 20.4. а — сверхтонкое расщепление уровня, вызванное электрон-протонной связью в атоме водорода, и его изменение в зависимости от напряженности магнитного поля (а); переход, обозначенный стрелкой, используется в мазере на водороде. Схема мазера на водороде (б) [5]. Пучок атомов водорода проходит вертикально через магнитную линзу, которая отфильтровывает возбужденные состояния в накопительный баллон. Далее они возбуждают колебания поля в резонаторе. В присутствии слабого поля  $B$  ( $\sim 10^{-7}$  Тл) переход сопровождается колебаниями магнитного диполя, параллельного  $B$ , связанными преимущественно с вертикальными осцилляциями магнитного поля в резонаторе

Вопреки всем разумным соображениям идея Рамсея о том, что подобное устройство можно реализовать на практике, блестяще подтвердилась. Дело в том, что соударения частиц друг с другом или со стенками резонатора столь мало возмущают связь спинов, что взаимодействие между атомами и полем резонатора остается когерентным по фазе более 1 с. За это время произвольный атом ударяется о стенку несколько тысяч раз. Следовательно,  $Q_m$  может достигать значений  $5 \cdot 10^9$ , что, возможно, в  $10^5$  раз превышает значение  $Q$  для резонатора. Очевидное следствие состоит в том, что температурные изменения и другие прямые возмущения активной



среды воздействуют на резонансную частоту в  $10^{-5}$  раз слабее, чем в случае, когда полый резонатор используют как стандарт частоты. В этом отношении мазер имеет большое преимущество над кварцевыми часами, но, разумеется, лишь в том случае, когда атом или молекула, приводящие мазер в действие, тщательно защищены от окружающего влияния. Очень высокое значение  $Q_m$  также приводит к стабильности по отношению к шумам. Для последней портивной модели [6] теоретическая оценка величины  $\Delta\omega_0/\omega_0$  составляет  $4 \cdot 10^{-14}/t^{1/2}$ , если  $t$  выражено в секундах. Стабильность обеспечивается на время от 10 с до 1 ч. Для того чтобы достичь этого прекрасного результата, нужно уделить чрезвычайное внимание ко всем деталям при проектировании устройства.

Для оценки значения такого результата полезно рассмотреть следующий типичный пример. В одной из проверок принципов работы водородного мазера Вессо и Питерс [7] сконструировали два мазера, которые были настроены на разность частот примерно в 1 Гц. При слабых полях частота линии зависит от поля квадратично, поэтому такую настройку удалось осуществить путем наложения нескольких различных слабых магнитных полей на каждый прибор. Сигналы с их выходов смешивались, а выделенная разность частот после усиления подавалась на таймер, записывающий время (около 10 с) за десять периодов. Результаты, полученные в последовательности из 19 измерений (в течение примерно 4 мин), отличались друг от друга только на  $\pm 3$  мс, что меньше чем  $1/300$  периода биений. Это означает, что за время, превышающее 10 с, дрейф фазы каждого мазера составил чуть менее одного градуса и  $\Delta\omega_0/\omega_0 \sim 10^{-13}$ . Последняя модель мазера, упоминавшаяся выше, примерно в шесть раз лучше этой.

## 21. МАЗЕРЫ. ОТ ЛАЗЕРА ДО ЛАМПЫ БЕГУЩЕЙ ВОЛНЫ

Мазеры на аммиаке и водородные являются наиболее простыми примерами управляемых приборов, работа которых основана на создании инверсной заселенности. Заложенную здесь общую идею можно понять, рассмотрев ансамбль квантовых систем, находившихся в тепловом равновесии при некоторой температуре  $T_0$ . Вероятность нахождения какой-либо из систем в состоянии с энергией  $E$  определяется больцмановским множителем  $e^{-E/(k_B T_0)}$ , который является монотонно убывающей функцией  $E$ . Излучение при температуре  $T_0$ , отражаясь от стенок резонатора, взаимодействует с ансамблем квантовых систем, но не нарушает равновесного распределения между энергетическими уровнями. Возникающие под действием излучения переходы вверх систем, находящихся в более низких энергетических состояниях и поэтому более заполненных, согласованы с переходами вниз систем, находящихся в более высоких энергетических состояниях и поэтому менее заполненных. Излучательная способность верхних состояний повышена, так как излучение отсюда происходит как спонтанно, так и вынужденно.

Если исследуемое распределение в основном обусловлено ростом заселенности высших уровней за счет низших, то механизм усиления заключается в том, что в результате когерентного вынужденного излучения радиационное поле усиливается больше, чем ослабляется из-за поглощения. В мазере на аммиаке усиление полностью преобладает над поглощением, если только возбужденные молекулы могут проникать в резонатор. Этот случай является экстремальным примером инверсии населенностей в активной среде, т. е. такой среде, в которой при соответствующих условиях может возникать усиление (в данном случае, когда среда занимает полость резонатора, настроенного на частоту, близкую к частоте молекул).

Уже было показано, что в выборе частоты резонатор играет второстепенную роль. Это происходит потому, что для этой цели гораздо более эффективны узкие молекулярные уровни. Если объем, занимаемый активной средой, велик и по длине составляет много длин волн, затухание может стать крайне малым и любая волна, попадающая в полосу частот перехода при прохождении через среду, будет усиливаться вынужденным излучением возбужденных молекул. Такой механизм лучше всего подходит для объяснения некоторых наблюдавшихся радиоастрономами микроволно-



вых излучений, когда яркостные температуры источников намного превышали температуру излучающего газового облака [1]. Подобное возбужденное облако внутренне нестабильно, и любая спонтанно возникшая волна подходящей частоты усиливается по мере прохождения через него. Однажды начавшись, этот процесс вскоре приводит к тому, что амплитуда волны начинает превышать уровень окружающего шума. Снятие возбуждения происходит в этом случае за счет волны, так как интенсивность вынужденного излучения пропорциональна мощности волны.

По той же причине любой относительно сильный сигнал, попадающий в облако извне, приобретает по мере прохождения через него доминирующее значение. Вероятно, возбужденные облака являются продуктом звездного взрыва, а расширяющаяся газовая оболочка, которая поддерживается в возбужденном состоянии не только оптическим и ультрафиолетовым излучениями, но, может быть, и самим микроволновым излучением звездного остатка, становится первичным источником значительно усиленного сигнала, который в конце концов доходит до нас. Для возбуждения эффективны фотоны высоких энергий, однако только узкополосное излучение с низкой энергией оказывается достаточно хорошо настроенным на соответствующие уровни энергии в газе, и тогда возникает его усиление.

Длительной когерентности у полученного таким образом излучения нет, потому что точно так же могут быть усилены колебания любого первичного источника, частота которого лежит в пределах ширины перехода. В турбулентном и расширяющемся газовом облаке наблюдатель может увидеть некогерентную спектральную линию, возможно сдвинутую и уширенную за счет эффекта Доплера. Однако, если усиленная волна после одного прохождения облака вернется в него обратно, она становится доминирующим источником, начинает расти за счет других второстепенных источников до тех пор, пока среда не получит дополнительной энергии в результате какого-нибудь процесса, приводящего к ее возбуждению. Непрерывность волны приводит к когерентности, но не обязательно к монохроматичности. Это объясняется тем, что сильная волна может столь быстро истощать среду, что усиленным окажется только короткий участок за ее фронтом. Тогда при последующих прохождениях возмущение развивается как короткий, но интенсивный импульс. Это явление — обычное для лазеров [2], работающих в видимой области спектра или вблизи от нее. Здесь, для того чтобы многократно прогонять излучение через активную среду, используют интерферометры Фабри — Перо или другие оптические резонаторы. Для лазерных генераторов получены потоки огромной интенсивности при энергии 500 Дж в импульсе длительностью 500 пс (длина цуга 15 см); при фокусировке на мишень это обеспечивало плотность потока  $10^{19}$  Вт·м<sup>-2</sup>. При этом напряженность электрического поля достигала  $6 \cdot 10^{10}$  В·м<sup>-1</sup>, индукции

магнитного поля — 200 Тл, а радиационное давление было близким к  $10^6$  атм\*.

В лазере в качестве резонатора используют интерферометр Фабри — Перо или какое-нибудь другое оптическое устройство. В этом случае доступно множество резонансных мод, причем некоторые из них оказываются очень близки по частоте и поэтому могут поддерживаться активной средой — это порождает новые проблемы. Даже в маломощных лазерах непрерывного действия, в которых не происходит сжатия импульсов за счет истощения среды, монохроматичность не обеспечивается автоматически. Это только одна из сторон конструирования лазеров, которая здесь не затрагивается. Соответствующих пояснений заинтересованный читатель не найдет и на последующих страницах — для этого лучше обратиться к другим доступным статьям [3]. Рассмотрение некоторых деталей работы мазера на аммиаке, проведенное в предыдущей главе, было обусловлено интересом к внутренним свойствам, которые превращают мазер в воспроизводимую модель важного физического принципа. В конце данной главы мы довольно подробно рассмотрим несколько микроволновых устройств и связанных с ними процессов. Анализ этих процессов дает новый материал, на котором можно будет обсудить эквивалентность классической и квантовой трактовки принципов работы мазеров (см. гл. 20). Цель нескольких последующих страниц — развеять чувство угнетенности, которое, возможно, возникло у вас из-за всех этих несколько педантичных рассуждений.

## 21.1. МЕХАНИЗМЫ ИНВЕРСИИ ЗАСЕЛЕННОСТЕЙ

Прямое разделение возбужденных молекул от невозбужденных с помощью линз имеет слишком ограниченную применимость. В этом параграфе мы обсудим некоторые методы получения инверсных заселенностей. Особое внимание мы уделим тем из них, которые можно использовать в лазерах. Многие методы вместе со специфическими примерами их применения уже изучены нами, и поэтому можно обойтись без изнурительного обзора. Рассмотрим лишь несколько наиболее важных методов.

1. **Оптическая накачка.** Активные элементы переходят из основного состояния I (рис. 21.1, а) в состояние III, возбуждаемое облучением квантами с энергией более высокой, чем та, которая получается в результате работы лазера. Это возбужденное состояние стремится к переходу в менее возбужденное состояние II, спонтанные переходы из которого в еще более низкое состояние являются редкими. В состоянии II создается значительная заселенность. При достаточно сильной накачке основное состояние может быть настолько обеднено, что его заселенность окажется меньше засе-

\* Следует заметить, что образующееся при лазерной плавке уплотнение поверхностных частиц обусловлено не радиационным давлением, а еще более высоким давлением отдачи испаренных из поверхностных слоев частиц.



ленности в состоянии  $II$  и работа лазера окажется возможной. Очевидно, при этом должен выполняться ряд условий. Их можно сформулировать в виде одного требования, а именно: активная среда должна обеспечивать высокий выход флуоресценции, так как основным путем снятия возбуждения является тот, который проходит через промежуточный энергетический уровень. В рубине этим свойством обладают ионы  $\text{Cr}^{3+}$ , присутствующие в нем в качестве примесей. Кристалл поглощает зеленый свет, что приводит к переходу ионов  $\text{Cr}^{3+}$  на довольно широкий уровень  $F$  (рис. 21.1, а). Поглощение при этом невелико и возвращение в основное состояние через вторичное излучение оказывается гораздо менее вероятным,

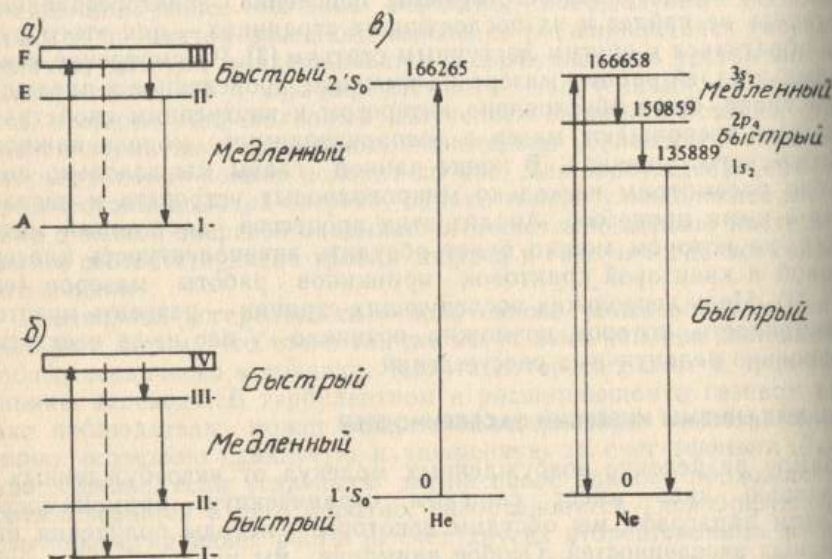


Рис. 21.1. Схема энергетических уровней в трехуровневом лазере (рубин) — а, б — энергетические уровни для четырехуровневого лазера ( $\text{Nd}$  в  $\text{YAG}$ ); в — энергетические уровни для непрерывного  $\text{He-Ne}$ -лазера

чем испускание некоторого числа фононов (квантов колебаний решетки), в результате которого возникает гораздо более продолжительное состояние, обозначенное  $E$ . Интенсивная накачка с помощью импульсной лампы может сильно обеднить основное состояние и перевести значительную часть ионов в состояние  $E$  за короткое, но сравнимое с временем жизни ( $\sim 3$  мс) время. Механизм быстрого безызлучательного перехода\* из состояния  $F$  в со-

\* Переход из состояния  $F$  в состояние  $E$  считается безызлучательным потому, что энергия излучается преимущественно в виде энергии колебаний решетки (фононов), а не в виде энергии фотонов. Из-за того, что расстояние между уровнями во много раз превышает энергию любого возможного для данной решетки фонона, одновременно может быть испущено некоторое количество фо-

стояние  $E$  несколько не ясен, но измерение числа красных квантов (переходы из  $E$  в  $A$ ), излученных за счет данного поглощенного числа зеленых квантов (переходы из  $A$  в  $F$ ), не оставляет сомнений в предпочтительности этого пути.

В отличие от лазера с тремя уровнями лазер с четырьмя уровнями (рис. 21.1, б) не требует существенного снижения заселенности основного состояния. Примерами тому могут служить лазеры на  $\text{Nd}^{3+}$  в иттриево-алюминиевом гранате или (что дешевле) в силикатном стекле. В этом случае излучательный уровень  $III$  разгружается не до основного состояния, а до возбужденного состояния  $II$ , которое само очень быстро разгружается и энергия которого достаточна для того, чтобы вызвать тепловое возбуждение. Таким образом, заселенность ионов в лежащем ниже уровне  $II$ , используемом в лазерном переходе, поддерживается очень незначительной.

**2. Газовый разряд.** Нечто подобное эффекту с оптической накачкой можно получить, пропуская большой ток через ионизированный газ. Применение грубой силы может вызвать непредсказуемые результаты.

Некоторые способы обратных переходов сильно возбужденных молекул в основное состояние могут оказаться предпочтительными и могут включать (как в случае четырехуровневого лазера) долгоживущий уровень, связанный с короткоживущим. Инверсия заселенностей тогда обеспечивается автоматически.

Такая схема реализована в гелий-неоновом лазере (рис. 21.1, в). Электрический разряд в смеси, состоящей из семи частей гелия и одной части неона, электронным ударом возбуждает атомы гелия до состояния  $2^1S_0$ , излучательные переходы из которого в основное состояние запрещены. Однако оказалось, что энергия возбужденного состояния  $3s_2$  неона в точности совпадает с энергией возбужденного состояния гелия, а сечение соударений атомов гелия и неона настолько велико, что такие состояния неона образуются за счет обмена энергией при столкновениях.

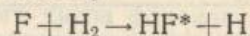
Начиная с этого момента и далее, неон ведет себя как активная среда четырехуровневого лазера, совершающая переход

ионов. Вероятный механизм можно визуализировать с помощью квазиклассического представления, представив себе, что он начинается, когда ион  $\text{Cr}^{3+}$ , находящийся в смеси состояний  $F$  и  $E$ , имеет свое распределение заряда и взаимодействует с быстрыми колебаниями локального окружения. Как известно, частота колебаний слишком высока, чтобы приводить к возникновению акустической волны, поэтому излучаются отдельные фононы. Но кристаллическая решетка ангармонична. В частности, растяжение и сжатие для нее не эквивалентны. Возникает нечто аналогичное выпрямлению — тот же самый процесс, который ответствен за тепловое расширение. В этом случае колебательное движение вокруг иона приводит к увеличению локального давления и вызывает ударную волну. Именно ударная волна очень быстро уносит энергию. Предел интенсивности удара не лимитирован, поэтому нет предела и числу низкочастотных фононов, которые могут в конечном счете возникнуть. Продолжительность этого, последнего, процесса для иона не имеет значения.

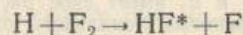


( $10^{-7}$  с) на более низкий уровень, убывающий весьма быстро ( $2 \cdot 10^{-8}$  с). Вследствие этого процесса создается инверсия заселенностей перехода  $3s_2 \rightarrow 2p_4$ . Следует заметить, что состояние  $3s_2$  допускает переходы как обратно в основное состояние, так и в состояние  $2p_4$ , однако захват резонансным излучением предотвращает снижение заселенности возбужденного состояния. В этом процессе излучение поглощается невозбужденным атомом неона, который переходит в состояние  $3s_2$ , занимая место первоначально возбужденного атома. При отсутствии доплеровского сдвига эффективное сечение резонансного поглощения равно  $1/2\pi/k^2$ , где  $k$  — волновое число (см. § 7.7). Тогда при концентрации атомов неона, равной  $n$ , средняя длина свободного пробега фотона равна  $2k^2/(\pi n)$ . Например, при давлении 0,1 Торр средняя длина свободного пробега составляет 1 мкм, но доплеровский сдвиг увеличивает это значение в  $m$  раз, где  $m$  равно отношению доплеровской ширины к естественной ширине линии. Это происходит потому, что только те атомы, которые не выводятся из резонанса доплеровским сдвигом, эффективно поглощают энергию. Даже в этом случае может оказаться, что фотон испытывает много актов поглощения и переизлучения прежде, чем покинет область разряда. В течение этого времени возбужденный атом обеспечивает работу лазера.

3. **Химическое возбуждение.** При соединении водорода и фтора во фтористый водород первое состояние образовавшейся молекулы оказывается высоковозбужденным. Предоставленная самой себе молекула в соударениях с другими молекулами теряет энергию, и результирующее повышение температуры можно истолковывать как термическую реакцию. Однако, если изъять невозбужденные молекулы, устойчивое образование оставшихся возбужденных молекул может оказаться способным к генерации и к созданию инверсии заселенностей. Лазер может работать в непрерывном режиме, если молекулы  $H_2$  и  $F_2$  постоянно подают в смесительную камеру, а удаляют из нее молекулы HF. Химическая реакция происходит при соударениях атомов фтора с молекулами водорода или атомов водорода с молекулами фтора. Причем обе реакции образуют бесконечную цепочку



с последующей реакцией



Звездочками отмечены возбужденные состояния. Добавление к водороду в небольшом количестве оксида азота во время смешивания потоков способствует образованию фтора:  $dO + F_2 \rightarrow NOF + F$ . Для взаимодействия молекул F и  $H_2$  не требуется лобовых соударений. Оно начинается, когда обе молекулы находятся на некотором расстоянии друг от друга и один из атомов водорода притягивается к атому фтора. Таким образом, HF и H могут расходиться на рас-

стояние, равное внутриаомному, которое в HF значительно превышает равновесное значение. Молекула оказывается в верхнем колебательном состоянии и релаксирует с частотой, лежащей в инфракрасной области. Именно когерентные колебания на этой частоте используют в лазерах. Однако при всей своей простоте очень большая химическая активность компонент делает эту систему не очень привлекательной.

Применение эксимеров помогает решить проблему изъятия невозбужденных молекул. Устойчивое химическое соединение криптона со фтором отсутствует, но KrF образует в некоторых возбужденных состояниях связанную молекулу (эксимер). При электрическом разряде в смеси криптона и фтора происходит реакция  $Kr^* + F_2 \rightarrow KrF^*$  и эксимер очень быстро исчезает, излучая довольно широкую линию (около 250 нм) в ультрафиолетовой области. Поэтому эксимер можно использовать в работе подающего перестройке ультрафиолетового лазера. Эксимер  $He_2$  приводит к возникновению фотонов с еще большей энергией в диапазоне 170—176 нм. При этом спонтанное сжатие возбуждения протекает столь быстро, что для создания достаточной заселенности эксимерный газ необходимо сжать до давления  $\sim 10$  атм и очень сильно возбудить. Мощност, рассеиваемая спонтанным излучением, соответственно оказывается высокой. Для этого необходима очень высокая мощность электронного луча (около 1 МВт). При таком уровне мощности возможным оказывается только импульсный режим работы, так как большая часть вводимой в систему энергии тратится на нагревание газа, а не на когерентное ультрафиолетовое излучение. Как бы то ни было, а сильные ультрафиолетовые импульсы получить можно.

4. **Полупроводниковый лазер.** На рис. 21.2, а схематично показана структура энергетических уровней  $p$ - $n$ -перехода в таком полупроводнике, как GaAs. Слева расположен достаточно высокий стимулирующий уровень теллурических доноров, образующих полосу заполненных состояний точно под потолком запрещенной зоны. Справа — атомы цинка (акцепторы), распыленные для насыщения доноров. В результате полупроводник  $p$ -типа имеет полосу вакантных состояний, расположенных как раз ниже основания края запрещенной зоны. В обедненном слое между  $p$ - и  $n$ -областями, по обе стороны которых уровень Ферми одинаков, в отсутствие внешнего воздействия имеется электрическое поле. Подача прямого напряжения (для ослабления поля) приводит к ситуации, изображенной на рис. 21.2, б. Возникает узкая область, в которой электроны зоны проводимости сосуществуют с вакантными местами в валентной зоне. Это приводит к инверсии заселенностей, а снятие возбуждения может вызываться электронами, попадающими на вакантные места и испускающими фотоны с длиной волны 840 нм в ближней инфракрасной области. Переход совершается быстро ( $\sim 10^{-9}$  с), потому что в GaAs в отличие от многих других полупроводников не требуется, чтобы фонон и фотон испускались одно-



временно. Материал прозрачен для света испускаемой длины волны и имеет вблизи  $p$ - и  $n$ -областей показатель преломления, несколько меньший, чем в узком активном слое между ними. Это, как показано на рисунке, приводит к ограничению излучения в окрестности слоя. Профиль амплитуды, неизменной по форме волны, бегущей со скоростью, промежуточной между скоростью плоской волны в слое и скоростью вне его, должен быть выпуклым для увеличения скорости в слое и вогнутым для уменьшения скорости вне его. Такая мода может приводить к резонансу при повторных отражениях волны от полированных торцов материала, она может усиливаться при вынужденных переходах электронов вниз в вакантные состояния.

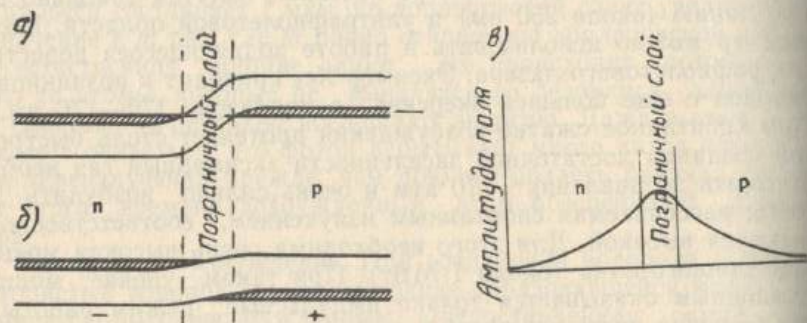


Рис. 21.2. Примесные зоны (показаны штриховкой) электронов в зоне проводимости  $n$ -типа и дырки в валентной зоне  $p$ -типа для GaAs, разделенные обедненным слоем (а); в равновесном состоянии уровень Ферми одинаков по всей толще материала; б — различия потенциалов, отмеченные знаками «+» и «-», позволяют электронам переходить из зоны проводимости в валентную зону через обедненный слой; в — электроны и дырки понижают диэлектрическую проницаемость везде, кроме обедненного слоя. Показанный амплитудный профиль обуславливает ускорение волны в обедненном слое и ее замедление во всех других местах, позволяя, таким образом, управляемой волне сохранять амплитуду при распространении вдоль границы раздела материалов с проводимостями  $p$ -типа и  $n$ -типа

**5. Серфинг и модуляция пучка частиц по плотности.** Этими терминами называют класс инверсионных процессов, которые имеют место при взаимодействии бегущей волны с потоком частиц, движущихся чуть быстрее нее. Частицы вынуждены замедляться, передавая при этом часть своей энергии волне. Примером этого процесса является усиление акустической волны, возникающее при прохождении тока, особенно в проводящих пьезоэлектрических кристаллах. На этом основана работа ламп бегущей волны, применяемых для генерирования колебаний в миллиметровом диапазоне.

Подобные устройства обычно принято рассматривать в строго классической манере. Однако их действие можно также рассматривать как результат инверсии заселенностей и вынужденного из-

лучения. Поэтому как примеры связи между классическими и квантовыми толкованиями они заслуживают более обстоятельного рассмотрения, чем мы вскоре и займемся.

## 21.2. КЛАССИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ПРОЦЕССАМ В МАЗЕРЕ

Обсуждение вынужденного излучения в гл. 20 показало, что его можно рассматривать как процесс, порождающий диэлектрическую среду (подобную среде в конденсаторе), которая обнаруживает себя как отрицательное сопротивление. В этом смысле мазер имеет очевидное сходство с колебательным контуром, включающим отрицательное сопротивление. Эту параллель можно продолжить при рассмотрении флуктуаций амплитуды и фазы. В поисках механизма когерентной раскачки системы путем поставки в нее фотонов вместо тех, что рассеяны из-за потерь, можно попытаться применить квантово-механический подход. Однако возникает одна трудность. В типичном лазере инверсная заселенность в отсутствие стимулированных переходов существует относительно долго, поскольку спонтанные переходы довольно редки. С другой стороны, в контуре с отрицательным сопротивлением (или в туннельном диоде) имеется устойчивая диссипация при нулевой частоте и стимулированные переходы, как правило, вызывают минимальное возмущение процесса достижения равновесия. Поэтому, даже если бы теорию работы осциллятора нам и удалось привести к виду, аналогичному теории для лазера, это оказалось бы всего лишь гимнастикой для ума.

## 21.3. ЭЛЕКТРОННЫЙ ЦИКЛОТРОН

Наши критические замечания не касаются того класса осцилляторов, к которому относят клистрон, магнетрон и лампу бегущей волны [4]. Их работу легко понять как с классической, так и с квантовой точек зрения.

Для иллюстрации сказанного рассмотрим возбуждение микроволнового резонатора электронами, совершающими циклотронное движение в мощном магнитном поле. Приборы, в которых использовался и этот процесс, разрабатывали [5] скорее как лабораторные модели, а не как промышленные устройства. Но нас больше интересуют не технические подробности, а физические принципы.

Основные свойства таких устройств можно смоделировать с помощью электронного двумерного облака. Каждая частица движется независимо по круговой орбите в плоскости, перпендикулярной индукции  $B$  магнитного поля и подвергается воздействию однородного электрического поля  $E$ . Это поле вращается в том же направлении, в котором происходит циклотронное движение частиц с частотой  $\omega$  (см. § 8.7). Практически происходит следующее: непрерывно инжектируемые электроны в очень узком интервале



энергий при среднем значении 20 кэВ дрейфуют вдоль  $\mathbf{B}$  по спирали, пребывая в резонаторе достаточно долго, чтобы под воздействием  $E$  сделать большое число витков. Для упрощения математических вычислений (с точки зрения физики это не имеет особого значения) предположим, что распределение времен пребывания электронов имеет экспоненциальный характер. Вероятность пребывания электрона под воздействием поля  $E$  в течение времени, превышающего  $T$ , равна  $e^{-t/T}$ .

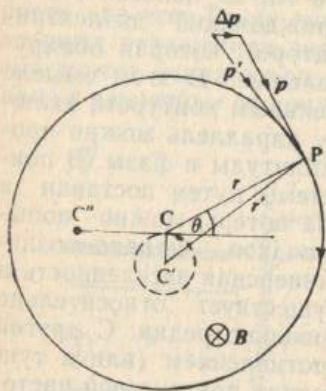


Рис. 21.3. Иллюстрация вычисления функции импульсного отклика для ансамбля электронов, совершающих циклотронное движение

Рассчитаем импульсный отклик для равномерно распределенных по орбите (рис. 21.3) электронов, у которых из-за этого отсутствует результирующий колебательный дипольный момент. Для электрона с импульсом  $p$  радиус  $r$  орбиты составляет  $p/(eB)$ . Это справедливо как для медленных электронов, так и для релятивистских. Электрон, находящийся в точке  $P$  в момент воздействия импульса, приложенного в горизонтальном направлении, приобретает от него дополнительный импульс  $\Delta p$ , вследствие чего  $p$  преобразуется в  $p'$ , и то время как сам электрон на мгновение остается в точке  $P$ . Его новая орбита должна быть касательной к  $p'$  и иметь такой радиус  $r'$ , что  $r'/r = p'/p$ . Из простых геометрических соображений следует, что точка  $C'$  лежит на вертикали ниже точки  $C$  на расстоянии  $\Delta p/(eB)$  от нее независимо от положения точки  $P$ . Следовательно, кольцо электронов начинает вращаться как единое целое вокруг  $C$ . Последующие колебания дипольного момента происходят так, как если бы весь заряд был сначала сконцентрирован в  $C$ , а затем начал вращаться с циклотронной частотой по орбите, изображенной штриховой линией. Если диссипация отсутствует, то импульсный отклик приводит к росту восприимчивости, но затухание  $e^{-t/T}$  вносит потери точно так же, как показано в гл. 8.

Чтобы подойти к этому выводу, пришлось предположить, что все электроны имеют одинаковую циклотронную частоту  $\omega_c = eB/m$  и не испытывают релятивистского изменения частоты при изменении момента. Это изменение, хотя оно и невелико для электронов с довольно низкой энергией, тем не менее лежит в основе работы всего устройства. Только благодаря этому изменению электроны могут преимущественно передавать энергию поля, а не поглощать ее.

Приложение импульса электрического поля приводит к увеличению импульса электронов, расположенных вблизи верха орбиты (рис. 21.3), и уменьшению их циклотронной частоты, в то время

как импульс электронов, расположенных вблизи основания орбиты, уменьшается, а их циклотронная частота — возрастает. Если рассматривать движение во вращающейся со средней частотой системе отсчета, то можно увидеть медленный дрейф влево электронов и у вершины, и у основания орбиты. В результате возникают избыток электронов слева и их недостаток справа. Центр инерции электронов представляется движущимся влево от точки  $C$  со скоростью, которую легко вычислить. Для электрона в точке  $P$  импульс возрастает на  $\Delta p \sin \theta$ , а частота — на  $\omega'_c \Delta p \sin \theta$ , где  $\omega'_c = d\omega_c/dp$ . Эта величина является отрицательной. Во вращающейся системе отсчета она представляет собой угловую скорость электрона. Горизонтальная составляющая скорости равна  $r\omega'_c \Delta p \sin^2 \theta$ , тогда как ее среднее значение для всего кольца составляет  $1/2 r\omega_c \Delta p$ . Поэтому через время  $t$  импульсный отклик будет представлен вектором  $C'C''$ , а не вектором  $C'C$ . Здесь  $CC'' = 1/2 r\omega'_c t \Delta p$ . В то же самое время в лабораторной системе отсчета вектор  $C'C''$  оказывается повернутым по часовой стрелке на величину  $\omega_c t$ . Следует заметить, что для малого импульса вектор  $CC'$  соответственно мал. Со временем вектор  $CC''$  может существенно возрасти, правда, не достигая радиуса орбиты, что позволяет сохранить линейное приближение.

Положение центра инерции через время  $t$ , записанное в комплексной форме, определяет функцию импульсного отклика. Под действием единичного импульса электрического поля  $\epsilon = \delta(t)$  изменение импульса составит  $\Delta p = e$ , поэтому  $CC' = 1/B$ , а  $CC'' = 1/2 r\omega'_c e t = \omega'_c p t / (2B)$ . Если на кольце находится  $N$  электронов, то отклик дипольного момента принимает вид

$$h(t) = (Ne/B) (i + 1/2 \omega'_c p t) e^{-i\omega_c t - t/T}, \quad t > 0. \quad (21.1)$$

Из соотношения (5.4) вытекает выражение для восприимчивости:

$$\chi(\omega) = \int_0^\infty h(t) e^{i\omega t} dt = \frac{NeT}{B(1 - i\delta T)} \left[ i + \frac{1}{2} \omega'_c p T / (1 - i\delta T) \right], \quad (21.2)$$

где  $\delta = \omega - \omega_c$ . Усиление или ослабление определяются мнимой частью  $\chi$ :

$$\chi''(\omega) = \frac{NeT}{B(1 + \delta^2 T^2)} [1 + \omega'_c p \delta T^2 / (1 + \delta^2 T^2)]. \quad (21.3)$$

Первый нерелятивистский множитель всегда обуславливает диссипацию, но ее можно превратить в усиление, произведя релятивистскую модуляцию плотности пучка, если второй сомножитель достаточно велик и имеет отрицательный знак. Величина  $\delta$  должна быть положительной, так как  $\omega'_c$  отрицательно, а оптимальная настройка возникает, когда  $\delta T = 1/2$ .

Время пребывания  $T$  должно быть достаточно продолжительным, чтобы  $|1/2 p \omega'_c T| > 1$ . Тогда  $p = mv / (1 - v^2/c^2)^{1/2}$ , а  $\omega_c = \omega_{c0} (1 - v^2/c^2)^{1/2}$ . Здесь  $m$  — масса покоя электрона, а  $\omega_{c0} = eB/m$ , из чего следует, что  $\omega'_c = -\omega_c v/E$ , где  $E$  — полная энергия электрона, вклю-



чая его энергию покоя  $mc^2$ . Критерий усиления состоит в том, чтобы выполнялось условие  $\omega_c T > 2E/(pv)$ . Для электронов с небольшой энергией отношение  $2E/(pv)$ , грубо говоря, представляет собой отношение энергии покоя к кинетической энергии и для электронов с энергией 20 кэВ составляет приблизительно 25. В этом случае усиление окажется возможным при  $\omega_c T > 25$ , а время пребывания окажется достаточно продолжительным для того, чтобы электрон успел сделать четыре витка. Технической проблемы это не составляет.

Если  $\omega_c T$  намного превышает критическое значение, усиление возможно в пределах настройки для частот от  $\omega_c$  до  $\omega_c + |\omega'_c \rho|$ , несмотря на то что множитель вне скобок в соотношении (21.3) ограничивает эффективность процесса при больших  $\delta$ . Впрочем, ясно, что особых предосторожностей, связанных с обеспечением однородности значений энергии электронов, не потребуется, поскольку эти электроны используются для возбуждения резонатора, настроенного на частоту, чуть превышающую максимальную циклотронную частоту, т. е. частоту электронов, имеющих минимальную энергию.

Квантовый анализ этой системы следует начать с рассмотрения одного-единственного электрона, находящегося на  $n$ -м энергетическом уровне ( $n$  очень велико). Известно, что его поведению в точности соответствует поведение гармонического осциллятора с силой  $f$ , равной  $n+1$  для переходов вверх и  $n$  для переходов вниз на соседние уровни. Эти переходы являются единственно разрешенными. Вследствие конечности времени пребывания уровни расширяются и имеют лоренцевские профили, если распределение времен жизни имеет экспоненциальный характер. При излучении электрона на частоте, вызывающей переходы вниз, могут совершаться и переходы вверх, для этого нужно только, чтобы расстояния между уровнями были одинаковыми. Тогда из-за большого значения  $f$  для переходов вверх в нерелятивистском случае поглощение преобладает над вынужденным излучением; возникает затухание. Только в том случае, когда релятивистские эффекты приводят к уменьшению расстояния между уровнями при более высоких энергиях, можно получить частоту излучения, большую  $\omega_c$ . Она будет в достаточной мере способствовать переходам вниз. Чистым результатом будет усиление, а не ослабление.

В случае больцмановского распределения электронов по энергиям для самого медленного электрона частота должна была бы превышать  $\omega_c$ . Тогда в большинстве процессов участие принимали бы только те электроны, для которых релятивистское преимущество минимально. При использовании очень однородного потока слабо-релятивистских электронов все они в более или менее равной мере дают вклад в усиление.

Для количественных оценок заметим, что функция импульсного отклика, согласно соотношению (13.39), выражается разностью двух величин. Но следует иметь в виду, что частота  $\omega_0$  не одна и

та же для электрона и для гармонического осциллятора, так как для переходов между уровнями  $n+1$  и  $n$  она составляет  $\omega_c(n)$ . Поэтому для линейного осциллятора в высоком квантовом состоянии с неограниченным, хотя и конечным, временем пребывания

$$h(t) = \frac{d}{dn} \left( \frac{ne^2}{m\omega_c} \sin \omega_c t \right) = \frac{d}{dn} \left( \frac{ne}{B} \sin \omega_c t \right).$$

Поскольку здесь присутствует множитель  $e^2$ , функция  $h(t)$  является дипольным откликом на единичный импульс электрического поля.

Электрон, движущийся по орбите, может быть представлен как двумерный осциллятор. Тогда соответствующая модификация приводит к тому, что  $h(t)$  вращается. Ее можно представить как комплексную величину:

$$h(t) = \frac{d}{dn} \left( \frac{ine}{B} e^{-i\omega_c t} \right) = \frac{e}{B} \left( i + nt \frac{d\omega_c}{dn} \right) e^{-i\omega_c t}. \quad (21.4)$$

Чтобы перейти к числу электронов и времени их дрейфа, умножим выражение (21.4) на  $Ne^{-t/T}$ . Далее заметим, что так как  $n \propto p^2$ , то  $nd\omega_c/dn = 1/2 d\omega_c/dp = 1/2 p\omega'_c = 1/2 reB\omega'_c$ . Тогда соотношение (21.4) становится идентичным выражению (21.1). После того как все преобразования оказались позади, можно не удивляться столь хорошему согласию между классическим и квантовым подходами: для гармонического осциллятора, о котором здесь шла речь, так и должно быть. Примечательным оказывается то, что процесс, который преимущественно способствует вынужденному излучению (в рассматриваемом случае расстояния между уровнями неодинаковы), одновременно является процессом, который вызывает модуляцию пучка по плотности и допускает систематическое развитие поляризованного состояния ансамбля, способного передавать энергию приложенному полю. Разумеется, верным является и то, что при более низкой частоте излучения, когда  $\delta$  в выражении (21.3) отрицательно, процесс модуляции пучка по плотности и в классическом, и в квантовом рассмотрении приводит к усиленному поглощению. Модуляция пучка по плотности представляет собой классическое выражение такого механизма передачи энергии, с помощью которого можно вызывать либо поглощение, либо излучение. Условия возникновения излучения таковы, что максимально увеличивается скорость перехода системы в такую точку распределения, где возникает инверсия заселенностей.

С точки зрения квантовой механики, в принципе, нет разницы между рассмотренной системой и атомом водорода, в котором под воздействием колеблющегося электрического поля возникают колебания концентрации электрического заряда, благодаря которым происходит передача энергии. Классический анализ можно применить и к не похожим на водородный атом протяженным системам, обсужденным выше.



#### 21.4. МОДУЛИРОВАНИЕ ПУЧКА ПО ПЛОТНОСТИ И РАБОТА МАЗЕРА

Подобное модулирующее действие можно рассматривать как классический механизм, с помощью которого в некоторых твердых телах происходит поглощение акустической волны или — при соответствующих условиях — ее усиление вследствие взаимодействия с электронами проводимости [6]. С квантовой точки зрения, этот процесс аналогичен процессам, происходящим при работе лазера.

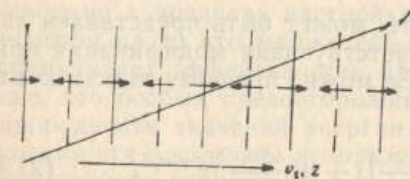


Рис. 21.4. Узлы (сплошные линии) волны сжатия и пучности (штриховые линии) волны сжатия в пьезоэлектрическом полупроводнике и картина результирующего электрического поля (короткие стрелки). Кроме того, показана траектория электрона, движущегося в этом поле

Любые электроны, испытавшие термическое или оптическое возбуждение, могут взаимодействовать с этим потенциалом, получая энергию от акустической волны или отдавая ее волне. Однако если длина свободного пробега электронов между соударениями много больше длины акустической волны, то для тех электронов, у которых компонента скорости  $v_z$  соизмерима со скоростью звука  $v_s$ , сильные взаимодействия окажутся ограниченными и они будут двигаться в почти постоянном поле. С классической точки зрения этой очевидно, поскольку любой электрон, перемещающийся попеременно через области с максимумами и минимумами поля, должен то ускоряться, то замедляться. При этом его энергия лишь незначительно отклоняется от среднего значения. В противоположность сказанному часть тех электронов, у которых скорость  $v_z$  равна скорости звука, постоянно ускоряется, а остальные электроны постоянно замедляются. Это создает реальную возможность для передачи полю значительной энергии.

Аналогичная ситуация возникает при квантовом рассмотрении, когда энергия и импульс передаются в виде квантов  $\hbar\omega$  и  $\hbar q$  (если, конечно, процессы не противоречат законам сохранения). Если небольшое приращение импульса электрона составляет  $\Delta p$ , его кинетическая энергия меняется на  $p \cdot \Delta p / m$ , т. е. на  $\hbar q p_z / m$ , когда  $\Delta p = (0, 0, \hbar q)$ . Приравняв изменение энергии  $\hbar\omega$ , получим требу-

емый результат: отношение  $p_z / m$  (которое и есть скорость  $v_z$ ) должно быть равно отношению  $\omega / q$ , т. е. скорости звука  $v_s$ .

Для иллюстрации аналогии между классическим модулированием потока по плотности и работой лазера достаточно рассмотреть простую одномерную модель, в которой электрон, находящийся в состоянии  $\Psi_0 = e^{i(kz - \Omega_k t)}$ , где  $\Omega_k = \hbar k^2 / (2m)$ , подвергается возмущению потенциалом  $V_0 \cos(qz - \omega t)$ , возникающим в момент времени  $t=0$ . Удобно воспользоваться такой системой отсчета, в которой волна покоится, а электрон движется со скоростью  $v = v_z - v_s$  при  $k = mv / \hbar$ . Если (как предполагается в расчетах)  $v > 0$ , то в лабораторной системе отсчета электрон опережает волну, поскольку это составляет условие усиления волны.

Будем учитывать столь слабые взаимодействия, при которых решение содержит только линейные относительно  $V_0$  величины. Тогда в этом приближении зависящее от времени уравнение Шредингера

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} - eV_0 \Psi \cos qz = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (21.5)$$

имеет решение

$$\Psi_1 = \exp\{i(kz - \Omega_k t)\} + a_1(t) \exp\{i[(k+q)z - \Omega_{k+q} t]\} + a_2(t) \exp\{i[(k-q)z - \Omega_{k-q} t]\}. \quad (21.6)$$

При волновых числах, отличающихся от  $k \pm q$ , с возбуждением связаны лишь слагаемые более высоких порядков малости по  $V_0$ . Подставив (21.6) в (21.5) и представив  $\cos(qz)$  в виде  $1/2(e^{iqz} + e^{-iqz})$ , получим

$$\begin{aligned} & \dot{a}_1 \exp\{i[(k+q)z - \Omega_{k+q} t]\} + \dot{a}_2 \exp\{i[(k-q)z - \Omega_{k-q} t]\} = \\ & = [eV_0 / (2i\hbar)] (e^{iqz} + e^{-iqz}) \Psi_1 \sim [eV_0 / (2i\hbar)] \{ \exp\{i[(k+q)z - \Omega_k t]\} + \\ & + \exp\{i[(k-q)z - \Omega_k t]\} \}, \end{aligned}$$

так как в функции  $\Psi_1$  величины, возникающие из  $a_{1,2}$ , являются величинами второго порядка малости относительно  $V_0$ . Комбинация слагаемых с  $(k+q)z$  и с  $(k-q)z$  приводит к раздельным уравнениям для  $\dot{a}_1$  и  $\dot{a}_2$ , из которых следует

$$\begin{aligned} a_1 &= a_1 \{1 - \exp[i\hbar(2kq + q^2)t / (2m)]\}, \\ a_2 &= a_2 \{1 - \exp[-i\hbar(2kq - q^2)t / (2m)]\}, \end{aligned} \quad (21.7)$$

так как  $a_{1,2} = 0$  при  $t=0$ .

В соотношениях (21.7)  $a_1 = meV_0 / [\hbar^2(2kq + q^2)]$ , а  $a_2 = -meV_0 / [\hbar^2(2kq - q^2)]$ . Тогда из соотношения (21.6) получаем

$$\begin{aligned} \Psi_1 &= \Psi_0 \{1 + a_1 e^{iqz} [e^{-i\hbar(2kq + q^2)t / (2m)} - 1] + \\ &+ a_2 e^{-iqz} [e^{i\hbar(2kq - q^2)t / (2m)} - 1]\}. \end{aligned} \quad (21.8)$$



Если считать, что произведение  $\Psi_0^* \Psi_0$  определяет начальную однородную плотность электронов  $\bar{\rho}$ , то соотношение (21.8) определяет ее развитие во времени:

$$\rho(t)/\bar{\rho} = \Psi_1 \Psi_1^* \sim 1 + 2(\alpha_1 + \alpha_2) \{ \cos q(z - vt) \cos [\hbar q^2 t / (2m)] - \cos qz \} + 2(\alpha_1 - \alpha_2) \sin q(z - vt) \sin [\hbar q^2 t / (2m)]. \quad (21.9)$$

Теперь видно, как в электронном потоке возникает периодическая модуляция пучка по плотности, возрастающая со временем. Скопления электронов дрейфуют относительно потенциала со средней скоростью  $v$ . Классический предел, который достигается, если положить либо  $\hbar\omega = 0$ , либо  $q/k = 0$ , вытекает из условия (21.9) после подстановки  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ :

$$2(\alpha_1 + \alpha_2) \sim eV_0 / (mv^2)$$

и

$$2(\alpha_1 - \alpha_2) \sim 2meV_0 / (\hbar^2 kq).$$

Следовательно,

$$[\rho(t)/\bar{\rho}]_{C1} \sim 1 - \frac{eV_0}{mv^2} [\cos q(z - vt) - \cos qz - qvt \sin q(z - vt)]. \quad (21.10)$$

Этот результат совпадает с результатом, полученным с помощью классического расчета воздействия потенциала на однородный поток частиц, двигавшихся первоначально с одинаковой скоростью. Последнее слагаемое с коэффициентом, пропорциональным  $t$ , неограниченно возрастает. Это происходит потому, что при включении потенциала электроны в разных точках имеют одинаковую кинетическую энергию, но различную потенциальную, а поэтому обладают различной полной энергией. Мигрируя по вершинам и впадинам потенциала, они имеют и разные средние скорости. Поэтому периодическая пульсация  $\rho$ , вызванная электронами, проводящими различное время возле вершин и впадин потенциала, накладывается на систематический рост модуляции, происходящий по мере того, как более быстрые электроны захватывают более медленные. Этот процесс (мы столкнемся с ним еще и при обсуждении клистрона) имеет свои пределы, поскольку, по мере того как более быстрые электроны перехватывают более медленные, модуляция пучка по плотности расплывается. Но это можно обнаружить лишь с учетом величин более высоких порядков по  $V_0$ . Чем меньше значение  $V_0$ , тем больше проходит времени, прежде чем в дело вступят нелинейные эффекты.

Перегруппировка в соотношении (21.10) позволяет яснее увидеть рост пиков  $\rho$  и их сдвиг относительно потенциала:

$$[\rho(t)/\bar{\rho}]_{C1} \sim 1 - [eV_0 / (mv^2)] [4 \sin^2(1/2 X) + X^2 - 2X \sin X]^{1/2} \sin(qz - X - \theta). \quad (21.11)$$

Здесь  $X = qvt$ , а  $\tg \theta = 2 \sin^2(1/2 X) / (X - \sin X)$ .

На рис. 21.5, а, б показаны амплитуда и фаза процесса модуляции пучка по плотности. Сначала модуляция  $\rho$  возрастает как  $t^2$  и достигает максимума там, где  $qz = \pi, 3\pi$  и т. д., т. е. в точках,

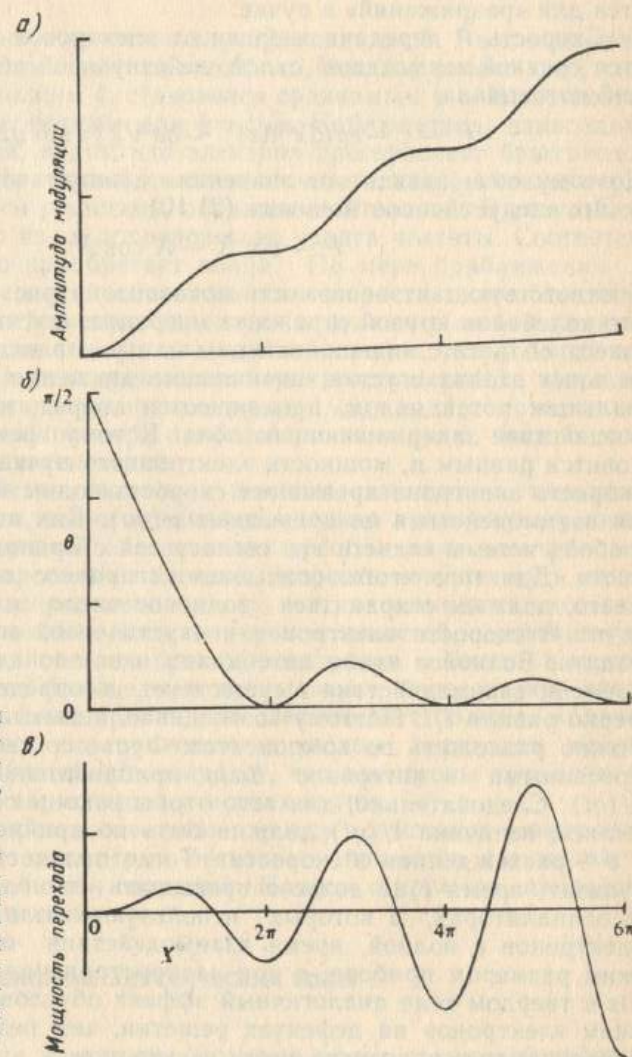


Рис. 21.5. Модуляция по плотности первоначально однородного пучка электронов, распространяющихся чуть быстрее, чем поле продольной волны: зависимости амплитуды (а) и фазы (б) флуктуаций плотности от расстояния  $X$  от точки входа однородного пучка; в — изменение скорости передачи энергии от электронов в волну

соответствующих минимумам потенциала (как ожидалось бы из элементарных динамических соображений). Со временем, по мере того как преобладающим становится линейный рост, так как  $\theta \rightarrow 0$ , центры сгустков начинают двигаться вместе с электронами, обладающими средней скоростью  $v$ , имея начало в точках с нулевым



потенциалом. В половине из этих точек осуществляется «фокусировка» сгустков в электронном пучке: отстающие электроны ускоряются, а оказавшиеся впереди центров — замедляются. В другой половине точек аналогичный процесс «фокусировки» осуществляется для «разряжений» в пучке.

Скорость  $P$  передачи энергии от электронов к волне определяется средней тормозящей силой, действующей вследствие флуктуаций потенциала:

$$P \sim \langle -e p (dV/dz) \rangle \sim q e^2 V_0 \langle \rho \sin qz \rangle.$$

Поэтому она зависит от значения и знака  $\sin qz$  — компоненты  $\rho$ . Это следует из соотношения (21.10):

$$P \sim \sin X - X \cos X. \quad (21.12)$$

Соответствующая зависимость показана на рис. 21.5, в. Очевидно, что колебания кривой отражают миграцию сгустков через чередующиеся области с задерживающим или ускоряющим полем. На начальных этапах сгустки, начинавшие движение из точек с минимальным потенциалом, продвигаются вперед, испытывая на себе воздействие задерживающего поля. К тому времени, когда  $X$  становится равным  $\pi$ , мощность электронного пучка истощается. Если скорость электрона превышает скорость волны на  $v$ , полезное время взаимодействия не превышает  $\pi(qv)$ . Как показано ниже, для любой системы отсчета это согласуется с принципом неопределенности. Для того чтобы описываемый процесс действительно имел место, должны сохраняться волновое число и энергия. При  $q \ll \ll mv/\hbar$  скорости электронов и акустической волны должны совпадать. Волновое число потенциала известно достоверно, но для времени взаимодействия  $t$  существует неопределенность  $\Delta\omega$ , примерно равная  $1/t$ . Поэтому возмущение, испытываемое электроном, можно разложить по компонентам Фурье со скоростями  $\omega/q$ , разбросанными в интервале  $\Delta\omega/q$ , приблизительно составляющем  $1/(qt)$ . Следовательно, для того чтобы законы сохранения выполнялись, величина  $1/(qt)$  должна быть по крайней мере сравнимой с  $v$  — расхождением в скоростях. Тогда получается ожидаемый результат: время  $t$  не должно превышать приблизительно  $1/(qv)$ . В осцилляторах, в которых используют взаимодействие пучка электронов с волной, время взаимодействия ограничено физическим размером прибора, а при распространении акустической волны в твердом теле аналогичный эффект обусловлен скорее рассеянием электронов на дефектах решетки, чем незначительной неопределенностью волнового числа электронов.

Приведенное рассуждение относилось к электрону, движущемуся быстрее волны, так что сгусток электронов забегал вперед в область с тормозящим полем. Наоборот, электрон, движущийся медленнее волны, отстает и оказывается в области ускоряющего поля. Такой электрон скорее ослабляет волну, а не усиливает ее. С квантовой точки зрения, относительные вероятности возбужде-

ния электронных состояний  $k \pm q$  задаются значениями  $a_1^2$  и  $a_2^2$ , т. е. величиной  $(2kq \pm q^2)^{-2}$ , если  $k = mv/\hbar$ . Если относительная скорость  $v$  положительна, то и  $k$  положительно, а  $a_1^2 < a_2^2$ , поскольку электроны скорее более склонны терять энергию, чем ее приобретать.

Противоположным является случай, когда  $v < 0$ . Различие между  $a_1$  и  $a_2$  становится особенно заметным, когда  $q$  вместо того, чтобы быть много меньшим  $k$ , становится сравнимым с  $k$ . В частности,  $a_2$  становится бесконечным при  $k = 1/2 q$ . Наблюдатель, движущийся вместе с волной, видит, что электрон претерпевает брэгговское отражение. В лабораторной системе отсчета электрон также отражается движущейся решеткой, образованной волной. В результате он теряет энергию из-за доплеровского сдвига частоты. Соответственно эту энергию приобретает волна. По мере приближения к классическому пределу относительная скорость  $v$ , необходимая для брэгговского отражения, отремится к нулю и в любом практическом случае  $|k|$  можно считать много большим, чем  $q$ . Тогда вероятность перехода вниз превышает вероятность перехода вверх на  $a_2^2 - a_1^2$ . Эта величина пропорциональна  $1/k^3$ , т. е.  $1/v^3$ ; она становится очень большой по мере приближения  $v$  к нулю, быстро приводя к инверсии населенностей.

При взаимодействии волны с потоком электронов, имеющих различные скорости, волна усиливается только в том случае, когда распределение скоростей обеспечивает преобладание электронов с чуть большими скоростями над теми, скорость которых чуть меньше. В той части распределения, где  $v_z \sim v_s$ , заселенности должны меняться противоположно изменению заселенностей, соответствующих тепловому равновесию, причем электронов с более высокой энергией становится больше, чем электронов с более низкой энергией. С квантовой точки зрения, это обеспечивает большее количество переходов вниз по сравнению с числом переходов вверх. С классических позиций это означает, что электроны предпочитают скапливаться в тормозящих участках волны.

Установив еще раз соответствие между сгустками электронов и работой мазера, рассмотрим несколько примеров взаимодействия волн с электронными потоками. Начнем с примера, приведенного в начале обсуждения.

## 21.5. ЗАТУХАНИЕ И УСИЛЕНИЕ АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛН В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ [6]

В сульфиде кадмия электроны, которые могут взаимодействовать с акустическими волнами, могут быть получены с помощью внутреннего фотоэффекта, когда при оптическом возбуждении связанные электроны валентной зоны переводятся в зону проводимости. Там они очень быстро оказываются в тепловом равновесии с распределением по скоростям Максвелла — Больцмана. Среднеквадратичная скорость при комнатных температурах составляет пример-



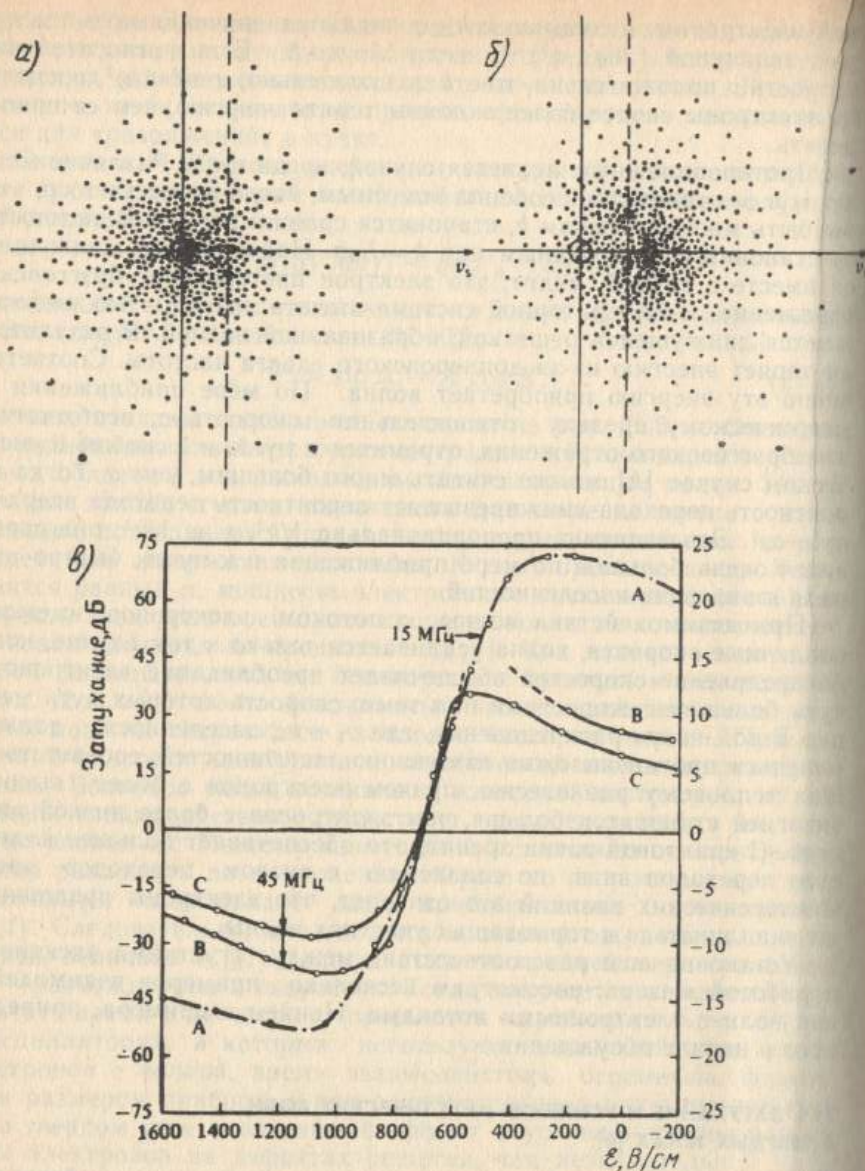


Рис. 21.6. Распределение Максвелла — Больцмана по скоростям (или по  $k$ ) для электронов (а) показано точками, штриховой линией показана поверхность взаимодействия, на которой находятся электроны на волновом фронте акустической волны; б — поле электрона сдвинуло  $k$ -распределение таким образом, что его центр находится справа от поверхности взаимодействия; в — затухание в CdS как функция напряженности продольного электрического поля [7]. По осям ординат: слева — затухание для кривых С и В, справа — для кривой А. При  $E > 700$  В/см происходит усиление волны

но  $10^5$  м/с, что, по всей видимости, в 50 раз превышает скорость звука.

Предположим (хотя это и совершенно не реально), что средняя длина свободного пробега электронов очень велика. Тогда единственными электронами, способными к обмену энергией с данной акустической волной, будут те, которые движутся с такой же скоростью, что и волна. Волна, движущаяся слева направо (рис. 21.6), может обмениваться энергией с электронами, вектор  $k$  которых лежит возле поверхности взаимодействия: возле плоскости нормальной к скорости волны и смещенной на величину  $mv_s/\hbar$  относительно начала координат. Из-за того, что нормальное распределение значений  $k$  (как на рис. 21.6, а) имеет наибольшую плотность в начале координат с устойчивым спадом по мере увеличения  $k$ , плотность слева от поверхности оказывается большей, чем справа. Следовательно, и процессов, которые ведут к поглощению энергии из волны, там больше, чем тех, что ведут к передаче энергии волне. Это объясняет акустическое затухание. Однако, прилагая сильное электрическое поле, можно, как показано на рис. 21.6, б, значительно сдвинуть распределение. Рисунок выполнен так, чтобы показать сдвиг в целом. Весьма вероятно, что при этом все распределение должно одновременно испытывать асимметричное расширение. Если не учитывать эту деталь, то совершенно ясно, что плотность справа можно, в принципе, сделать большей, чем слева. Тем самым акустическое затухание будет превращено в усиление за счет преобладания процессов излучения над процессами поглощения.

Этот анализ слишком примитивен, чтобы объяснить наблюдавшиеся в эксперименте детали предсказанного явления (рис. 21.6, в), поскольку требование большой средней длины свободного пробега практически невыполнимо и взаимодействие не ограничивается электронами, находящимися вблизи поверхности взаимодействия. Форму кривой можно довольно хорошо получить с помощью не слишком запутанных классических рассуждений, основанных на решении уравнения проводимости для полей, изменяющихся в пространстве и во времени [8].

В противоположность этому чисто квантовый вывод, учитывающий многократное рассеяние волн, оказался бы непомерно трудным. Дело не только в том, что в этом выводе может оказаться глубоко скрытым такое обстоятельство: фундаментальное положение о переходе от затухания к усилению при преобладании скорости дрейфа на скоростью звука является почти неизбежным следствием любой теории, в которой волновой и электронный ансамбли являются единственно важными компонентами. До тех пор, пока устойчивое электрическое поле служит главным образом для того, чтобы сообщать электронам скорость дрейфа без существенного изменения их распределения, в системе отсчета, движущейся со скоростью дрейфа, наблюдатель будет видеть, что взаимодействие волны с электронами приводит к затуханию волны. Для этого на-



блюдателя затухание представляет собой единственный процесс, способный увеличивать энтропию, а по этой причине — вообще единственно возможный процесс. Что касается лабораторной системы отсчета, то волна и электроны могут двигаться слева направо, но если скорость электронов превышает скорость звука  $v_s$ , то движущийся наблюдатель увидит волну следующей влево и обнаружит, что ее амплитуда слева меньше, чем справа. В лабораторной системе отсчета это означает усиление волны по мере ее распространения.

В эксперименте, результаты которого показаны на рис. 21.6, *а*, все устройство использовали в качестве усилителя, но в нем могли возникать спонтанные колебания. Форма акустической волны такова, что та ее часть, что движется вместе с электронным потоком, усиливается сильнее, чем затухает часть волны, движущаяся в противоположном направлении. Поэтому стоячая волна только усиливается. Несмотря на то что когерентные колебания не наблюдались, всплески шумов были обнаружены даже при отсутствии акустических волн на входе устройства. Их амплитуда достигала насыщения, определяемого диссипацией, компенсировавшей вклад электронов лишь через значительное время после многократных отражений. В отличие от мазера на аммиаке источник здесь имеет скорее непрерывный спектр состояний, а не несколько отчетливых линий. Точной настройки не требуется и с электронной популяцией может взаимодействовать очень широкий диапазон резонансных мод, поэтому воздействие электронного потока на спонтанно возникающие акустические колебания невелико.

Сказанное остается в силе и для рассматриваемых далее устройств, работа которых основана на аналогичных принципах. В них управление частотой осуществляют резонаторами, что позволяет производить настройку в широком диапазоне частот без снижения усиления, вызванного нерезонансными свойствами активной среды.

## 21.6. ЛАМПА БЕГУЩЕЙ ВОЛНЫ

Проволочная спираль, окруженная цилиндрическим металлическим кожухом (рис. 21.7), действует как коаксиальная линия передачи, по которой из-за индуктивности внутреннего проводника электромагнитные волны распространяются довольно медленно. Более того, вне спирали линии напряженности электрического поля оканчиваются на поверхностных зарядах, которые также создают компоненту напряженности вдоль оси. Это один из примеров волны, которая может быть усилена из-за взаимодействия с электронным потоком, движущимся быстрее, чем она сама. Если не претендовать на полный анализ, который мог бы раскрыть детали устройства осциллятора, то сказанного выше уже достаточно для того, чтобы установить принцип, фактически совпадающий с принципом волнового усиления в CdS. Однако в рассматриваемом случае не возникает проблем, связанных с соударениями (хотя силы, связан-

ные с пространственным зарядом, могут оказаться значительными). Поэтому квантовую теорию взаимодействий можно считать столь же надежной, как и классическую теорию модуляции пучка по плотности.

В CdS распределение по скоростям электронов, находящихся в тепловом равновесии, захватывает гораздо больший диапазон скоростей, чем окрестность вокруг скорости волны; в нашем же случае имеет место обратная ситуация. Электронная пушка может обеспечить хорошо сфокусированный поток электронов с почти одинаковыми энергиями. Поэтому, регулируя ускоряющее напряжение, можно добиться того, что скорость движения большей части электронов окажется чуть-чуть большей, чем скорость волны. Взаимодействие между ними соответственно окажется более сильным, чем в случае с CdS.

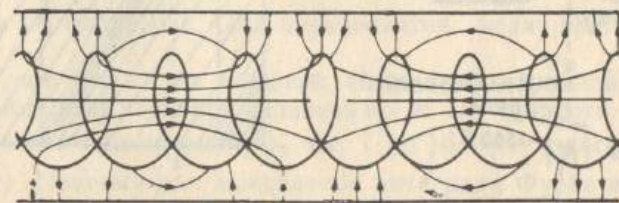


Рис. 21.7. Распределение электрического поля в коаксиальной линии передачи со спиральным внутренним проводником

В одной из действующих приборов возникающую усиленную волну с помощью обратной связи вновь направляют на вход устройства. В результате получают кольцевой резонатор, который можно рассматривать как спонтанно возбуждаемое устройство (наподобие мазера) с инверсной заселенностью энергетических состояний в электронном луче.

## 21.7. КЛИСТРОН

Этому прибору мы уделим больше внимания, чем другим, потому что в идеализированном виде его работа очень просто иллюстрирует как процессы модуляции пучка по плотности, так и процессы, происходящие в мазере. Подобный анализ работы клистрона не представляет затруднений.

В зависимости от назначения прибора существует несколько вариантов его конструкции. Рассмотрим только один тип, а именно отражательный клистрон. Многие годы (до тех пор, пока конкуренцию ему не составили твердотельные приборы) он был наиболее удобным и надежным маломощным генератором, работавшим в непрерывном режиме в диапазоне частот  $10^9$ — $10^{11}$  Гц. Резонатор, показанный на рис. 21.8, *а*, имеет осевую симметрию и поддерживает основную моду, которая обеспечивает существование пере-



менного электрического поля в центре зазора. Эта область находится в вакуумной трубке (на рисунке не показана). Пучок электронов ускоряется электронной пушкой. Специальный отражающий электрод с более высоким по модулю отрицательным потенциалом (по отношению к потенциалу катода) возвращает пучок электронов, прошедших через зазор, обратно. Будем считать, что зазор очень узок, а задерживающее поле между резонатором и отражающим электродом постоянно.

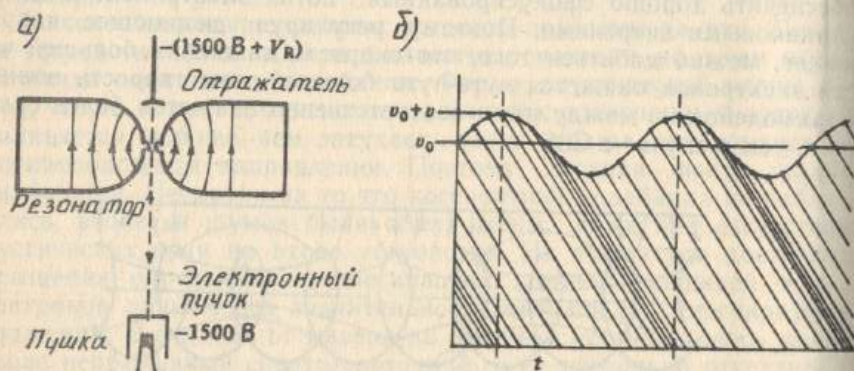


Рис. 21.8. Схема отражательного клистрона — а (резонатор показан частично: он представляет собой тор со щелью, расположенной на внутренней поверхности, через которую электрическое поле распространяется при взаимодействии с пучком электронов); б — иллюстрация механизма модуляции пучка по плотности

Если резонатор возбужден на частоте  $\omega$ , то электроны, прибывающие со скоростью  $v_0$ , покидают его со скоростью  $v_0 + v \cos \omega t$ . При этом в зависимости от фазы переменного поля в зазоре электроны в момент прохождения зазора либо ускоряются, либо замедляются. Так меняется скорость всех электронов пучка. Поэтому наиболее быстрые электроны позже всех возвращаются обратно (сравните с мячом, брошенным вверх). Для значений  $\omega t$  вблизи  $\pi/2$  выигрыш в приобретенной в зазоре скорости для последующих электронов неуклонно уменьшается. Следовательно, такие электроны вернутся в зазор раньше и пучок окажется еще более сконцентрированным. Спустя полпериода пучок соответственно окажется истощенным.

Схематично процесс изображен на рис. 21.8, б. Электрон, прибывающий в момент времени  $t$ , возвращается обратно через время  $C(v_0 + v \cos \omega t)$ . Здесь  $2/C$  — величина, обратная ускорению. Линии, градиент которых составляет  $-1/C$ , пересекаются с горизонтальной осью в моменты времени, когда возвращается порция тех перегруппированных электронов, что первоначально находились на равных расстояниях друг от друга и начали движение в моменты времени, соответствующие фазам  $\omega t$ , последовательно

отличающимся друг от друга на  $\pi/6$ . Ясно, что в случае достаточно большого возбуждения резонатора или достаточно слабых задерживающих потенциалов синусоида на части своего периода может быть более крутой, чем линии задерживающего поля, вследствие чего электроны возвращаются перегруппированными. Там, где прямые линии касательны к синусоиде, локальная плотность при возвращении пучка оказывается бесконечной (или была бы бесконечной, если бы пространственный заряд не препятствовал этому). Поэтому в принципе модуляция пучка по плотности может приводить к существенно несинусоидальному распределению заряда в пучке. И действительно, клистроны являются хорошими устройствами для умножения частоты из-за высокой степени сохранения гармоничности сигналов.

Однако нас интересует самовозбуждающийся осциллятор. Для анализа необходимо знать только основную компоненту модуляции пучка по плотности. Она определяется величиной  $\int_0^{2\pi/\omega} j(t') \times e^{i\omega t'} dt'$ , где  $j(t')$  — ток в зазоре, вызванный отраженными электронами. Каждый электрон независимо от его скорости ответствен за такой острый импульс  $j(t')$ , что  $\int j(t') dt' = e$  (здесь  $e$  — заряд электрона). Поэтому для вычисления интеграла Фурье необходимо только просуммировать функции  $e^{i\omega t'}$  для каждого электрона в моменты времени  $t'$  обратного прохождения электронов через зазор. Трудности, которые могли бы возникнуть из-за своеобразной формы  $j(t)$ , исключены. Таким образом, электроны, совершившие свой первый пролет через зазор в интервале между  $t$  и  $t + dt$ , несут полный заряд, пропорциональный  $dt$  (опустим все постоянные и рассмотрим исключительно форму поведения), и прибывают обратно в зазор в момент времени  $t'$ , который равен  $t + C(v_0 + v \cos \omega t)$ . Отсюда немедленно следует, что основная компонента тока  $j_1$  принимает вид

$$j_1 \sim \int_0^{2\pi/\omega} e^{i\omega[t+C(v_0+v \cos \omega t)]} dt \sim i e^{i\omega C v_0} J_1(\omega C v). \quad (21.13)$$

где  $J_1(x)$  — функция Бесселя первого рода первого порядка:

$$J_1(x) = \frac{1}{2}x - \frac{1}{16}x^3 + \frac{1}{384}x^5 - \dots$$

Смысл полученного результата ясен из рис. 21.8, б:  $J_1(\omega C v)$  есть мера степени модуляции пучка по плотности, в то время как  $\omega C v_0$  представляет собой сдвиг порции сгруппировавшихся электронов по отношению к переменному полю. На рисунке сгустки электронов изображены таким образом, что максимумы плотности совпадают с пиками поля резонатора — максимумы тока в отра-



женном пучке встречают сильное тормозящее поле и поэтому передают энергию резонатору. Отношение  $j_1$  к напряженности поля в зазоре (которому пропорционально  $v$ ) можно рассматривать как эффективный импеданс, создаваемый электронным лучом в том случае, если поведение резонатора моделируется с помощью последовательного LCR-контура. В дополнение к фиксированным компонентам контура в нем имеется импеданс вида

$$Z_{\text{пучка}} = iAe^{i\omega C v_0} J_1(\omega C v)/v, \quad (21.14)$$

где  $A$  — постоянная, определяемая плотностью луча, конфигурацией зазора и т. д. На рисунке  $\omega C v_0 = 3\pi/2$ , а  $Z_{\text{пучка}}$  — действительная и отрицательная величина, обеспечивающая необходимую регенерацию. В более общем смысле  $R_{\text{пучка}}$  — активная часть  $Z_{\text{пучка}}$  — равна  $A \sin(\omega C v_0) J_1(\omega C v)/v$ , а реактивная часть  $X_{\text{пучка}} = -iA \cos(\omega C v_0) J_1(\omega C v)/v$ . Если колебания могут поддерживаться, они устанавливаются на такой амплитуде скорости  $v$ , что  $R_{\text{пучка}} + R = 0$ .

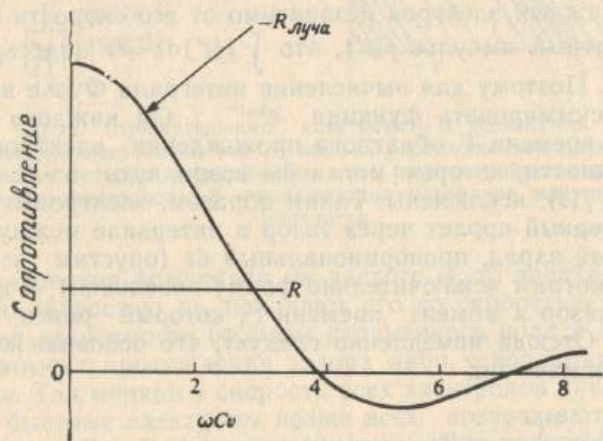


Рис. 21.9. Вид действительной части соотношения (21.14)

На рис. 21.9 показано, как могло бы появиться решение при почти оптимальных условиях настройки  $\omega C v_0 = 3\pi/2$  (пучок электронов в четыре раза более интенсивный, чем нужно для возбуждения колебаний). Амплитуда растет до тех пор, пока  $v$  приближается к первому нулю величины  $R_{\text{пучка}}$ , что происходит при  $\omega C v = 3.83$ , т. е. при первом нулевом значении функции  $J_1(x)$ . В этот момент  $v \sim 0.8v_0$  и пучок испытывает сильную модуляцию. Если, как в нашем примере, возможно большое усиление, то для уменьшения значения  $\cos(\omega C v_0)$  без срыва колебаний поле отражателя можно менять в широких пределах. Вносимое при этом изменение

$X_{\text{пучка}}$  приводит к изменению частоты. Нетрудно заметить, что таким способом можно настраивать клистрон в широком диапазоне частот, в несколько раз превышающем полосу частот резонатора в режиме свободных колебаний.

Обратимся теперь к квантовой трактовке системы, рассматривая поле резонатора как зависящее от времени возмущение электронов в пучке. Это простая одномерная задача о частице, находящейся в потенциале, который при невозбужденном резонаторе равен нулю при  $x < 0$  (между электронной пушкой и зазором) и  $2mx/C$  при  $x > 0$  (между зазором и отражающим электродом). Поскольку длина волны де Бройля в миллионы раз меньше размеров зазора, можно ожидать, что решение уравнения Вентцеля — Крамерса — Бриллюэна окажется хорошим приближением к функции Эйри (см. § 14.3), являющейся решением для линейного измерения потенциала, как это имеет место в области положительных значений  $x$ . Для отрицательных  $x$  годится решение в виде синусоидальной стоячей волны, узлы которой связаны с функцией Эйри. Электрон с энергией  $E$  обладает в точке  $x$  кинетической энергией  $E - 2mx/C$  и волновым числом  $(2mE - 4m^2x/C)^{1/2}/\hbar$ . Изменение его фазы  $2\varphi$  на пути от зазора до отражателя и обратно составляет  $2 \int k dx$ . Эту величину сразу же можно записать так:

$$\varphi = [2(2mE)^{1/2}/\hbar] \int_0^{x_0} (1 - x/x_0)^{1/2} dx.$$

Здесь  $x_0 = CE/(2m)$  — классическая точка поворота электронов. Следовательно,

$$\varphi = \sqrt{2CE^3/2}/(3\hbar m^{1/2}). \quad (21.15)$$

Каждое приращение  $E$ , увеличивающее  $\varphi$  на  $\pi$ , сдвигает стоячую волну в точке  $x=0$  от одного узла до другого. Поэтому ненормированную волновую функцию в области  $x < 0$  можно записать так:

$$\psi = \cos(kx - \varphi)e^{\lambda x}; \quad x < 0. \quad (21.16)$$

Экспоненциальный множитель  $e^{\lambda x}$ , где  $\lambda$  очень мало, добавлен для обеспечения сходимости решений в последующем. Для физического правдоподобия можно предположить, что электроны вводят в пучок не пушкой, а вносят вдоль всего пути следования пучка в направлении к резонатору и последовательно удаляют из пучка на обратном пути. Это избавляет от необходимости учитывать граничные условия для пушки (что имеет физический смысл) и не позволяет электронам совершать повторные когерентные по фазе прохождения по всему пути.

В режиме колебаний резонатор создает возмущающий потенциал  $V \cos \omega t$  в виде ступенчатой функции, которая не обращается



в нуль только в области  $x < 0$ , где  $\psi$  принимает простую форму (21.16):

$$V' = V_0; \quad x > 0, \\ V' = V_0 + V_1; \quad x < 0.$$

Здесь  $V_1 = \frac{1}{2}m[(v_0 + v)^2 - v_0^2]$ . Когда  $V_1$  мало (только этот случай мы и рассматриваем), из строгой периодичности  $V' \cos \omega t$  следует, что данное состояние  $E$  с волновым числом  $k$  оказывается заметно возмущенным только при внесении состояний  $E \pm \hbar\omega$ . Вероятность перехода, приводящего к одному из этих состояний, например  $k'$ , пропорциональна квадрату матричного элемента, т. е.

$$M_{kk'} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^* V' \psi_k dx = V_1 \int_{-\infty}^0 \psi_k^* \psi_k dx,$$

потому что ортогональность обеспечивает выполнение условия

$$V_0 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_k^* \psi_k dx = 0.$$

Тогда из соотношения (21.16) при  $\lambda \rightarrow 0$  следует

$$M_{kk'} \approx \frac{1}{2} V_1 \sin(\varphi' - \varphi)/(k' - k). \quad (21.17)$$

Здесь пренебрегаем величинами, содержащими  $k + k'$  (они малы в знаменателях. Интерес представляет различие значений  $|M_{kk'}|^2$  для переходов вниз и вверх. Биномиальное разложение соотношения (21.15) с заменой  $E$  на  $E + \hbar\omega$  показывает, что

$$\varphi' = \varphi \left( 1 \pm \frac{3}{2} \varepsilon + \frac{3}{8} \varepsilon^2 + \dots \right), \quad \text{где } \varepsilon = \hbar\omega/E.$$

Верхний знак относится к переходу в  $E + \hbar\omega$ . Следовательно,

$$\sin(\varphi' - \varphi) = \pm \sin\left(\frac{3}{2} \varepsilon \varphi\right) + \frac{3}{8} \varepsilon^2 \varphi \cos\left(\frac{3}{2} \varepsilon \varphi\right) + \dots \quad (21.18)$$

Аналогичное разложение для  $k$ , которое пропорционально  $E^{1/2}$ , дает

$$1/(k' - k) = \pm 2/(\varepsilon k) + 1/(2k) + \dots \quad (21.19)$$

Следовательно,

$$|M_{kk'}| = [EV/(m\omega v_0)]^2 [\sin^2 \xi \pm \frac{1}{2}(\hbar\omega/E) \sin \xi (\sin \xi + \xi \cos \xi) + \dots], \quad (21.20)$$

где  $\xi = \frac{3}{2} \varepsilon \varphi = \frac{1}{2} \omega C v_0$ .

Действие мазера оказывается максимальным, когда отрицательный знак дает больший матричный элемент, т. е. когда

$\sin \xi (\sin \xi + \xi \cos \xi)$  принимает максимальное отрицательное значение. Вторая величина, пропорциональная  $\xi \sin 2\xi$ , выражает то же самое условие, что и классический расчет. Если  $C$  изменяется, то усиление оказывается наибольшим, когда  $C \sin(\omega C v_0)$  достигает максимального отрицательного значения. Первая, относительно неважная величина является, вероятно, результатом неадекватной аппроксимации волновых функций. Приближение Вентцеля—Крамерса—Бриллюэна может потребовать уточнения в том случае, когда матричные элементы приходится разлагать в ряд до членов второго порядка. Но не будем стремиться к полному согласию. На этой стадии приближения достаточно ясным оказалось главное: модуляция пучка по плотности и работа мазера, как и другие примеры, являются альтернативными описаниями фундаментального и в своей основе простого физического процесса переноса энергии.



## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как и положено для книги, относящейся к квантово-механическому рассмотрению колебательных процессов, мы начали с квантового расчета и им же закончили. Однако мы никогда не допускали далеких отступлений от классических моделей. В самом деле, в первой главе обстоятельно обсуждались обоснования классических рассуждений, а рассмотрение самой последней из рассмотренных проблем имело целью показать (как бы неожиданно это ни казалось), что методы квантовой механики иногда можно применять к тем системам, которые физики и инженеры интуитивно относят к чисто классическим. Обсуждения, раскрывающие внутреннюю сущность физических процессов и обнаруживающие как силу, так и слабость доступного аналитического аппарата, были достаточно когерентны и не предполагали иных доводов, кроме приведенных в книге. Даже в случае довольно простых систем, рассмотренных и в этом, и в предыдущем томах, отчетливо видно, насколько возрастают возможности тех исследователей, которые владеют как классическим, так и квантовым подходом. Читателю, которому придется иметь дело со сложными колебательными процессами, будет легче, если он сможет пользоваться и первым и вторым методами, хотя порой на отдельных этапах это будет казаться слишком вычурным. Понимание простых процессов поможет распознать опасности, скрытые в обоих подходах, — опасность завести классические рассуждения слишком далеко в квантовую область и опасность насильственного сверхупрощения физических систем с невыполнимой целью сделать их пригодными для квантово-механического анализа.

## ЛИТЕРАТУРА

### К ГЛАВЕ 13

1. *J. L. Powel, B. Crasemann*, Quantum Mechanics, p. 127 (Reading, Mass: Addison—Wesley, 1961).
2. *L. Pauling, E. B. Wilson*, Introduction to Quantum Mechanics, p. 67 (New York: McGraw—Hill, 1935).
3. Ref. 2, p. 81.
4. *M. Abramowitz, I. A. Stegun*, Handbook of Mathematical Functions, p. 475. (New York: Dover, 1965).
5. Ref. 1, p. 98.
6. *G. M. Murphy*, Ordinary Differential Equations and Their Solutions, p. 15 (Princeton, NJ: Van Nostrand, 1960).

### К ГЛАВЕ 14

1. *A. Sommerfeld* (tr. *H. L. Brose*), Atomic Structure and Spectral Lines, p. 232 (London: Methuen, 1923).
2. Ref. 13.4, p. 256.
3. Ref. 1, p. 304.
4. *D. ter Haar*, Elements of Hamiltonian Mechanics, 2nd Ed., p. 129 (Amsterdam: North—holland, 1964).
4. Ref. 13.4.
5. *J. C. P. Miller*, The Airy Integral, (B. A. Mathematical Tables, Cambridge University Press, 1946).
6. Ref. 13.2, p. 271.
7. Ref. 13.1, p. 387.
8. Ref. 13.1, p. 140.
9. *R. J. Le Roy*, Molecular Spectroscopy, Vol. 1, Ch. 3 (London: The Chemical Society, 1973).

### К ГЛАВЕ 15

1. *G. Herzberg*, Molecular Spectra and Molecular Structure, Vol. 2, p. 215 (New York: Van Nostrand, 1945).
2. *N. Minorsky*, Non—linear Oscillations, p. 506 (Huntington, NY: Krieger, 1974).
2. *E. Breitenberg, R. D. Mueller*, 1981, J. Math. Phys. 22, 1196.
3. *A. B. Pippard*, 1964, Phil. Trans. Roy. Soc. A256, 317.
4. *J. M. Ziman* (ed.), The Physics of Metals, 1. Electrons, p. 118 (Cambridge University Press, 1969).
5. *L. Onsager*, 1952, Phil. Mag. 43, 1006.
6. *E. I. Blount*, Solid State Physics (ed. Seitz and Turnbull), Vol. 13, p. 305 (New York: Academic Press, 1962).
7. *P. J. Lin, L. M. Falicov*, 1966, Phys. Rev., 142, 441.
8. Ref. 4, p. 145.
9. Ref. 4, p. 62.
10. Ref. 4, p. 129.
11. *R. W. Stark*, 1964, Phys. Rev., 135, A1698.
12. *L. M. Falicov, H. Stachowiak*, 1966, Phys. Rev., 147, 505.



# К ГЛАВЕ 16

1. *B. I. Bleaney, B. Bleaney*, Electricity and Magnetism, 3rd edition, p. 248 (Oxford University Press, 1976).
2. *R. L. Sproull, W. A. Phillips*, Modern Physics, 3rd edition, p. 653 (New York: Wiley, 1980).
3. Ref. 2, p. 258.
4. *J. M. Jauch, F. Rohrlich*, The Theory of Photons and Electrons, 2nd edition, p. 171 (New York: Springer-Verlag, 1976).
5. *N. W. Ashcroft, N. D. Mermin*, Solid State Physics, p. 519 (New York: Holt, Rinehart and Winston, 1976).

# К ГЛАВЕ 17

1. *D. H. Auston*, Topics in Applied Physics (No. 18, Ultrashort Light Pulses, ed. S. L. Shapiro) p. 123 (Berlin: Springer-Verlag, 1977).
2. *E. U. Condon, G. H. Shortley*, The Theory of Atomic Spectra, p. 133 (Cambridge University Press, 1935).

# К ГЛАВЕ 18

1. Ref. 13.1, p. 258.
2. *W. A. Phillips*, 1970, Proc. Roy. Soc. A319, 565.
3. *H. Fröhlich*, Theory of Dielectrics, p. 70 (Oxford: Clarendon Press, 1949).
4. *C. J. Gorter*, Paramagnetic Relaxation (New York: Elsevier, 1947).
5. *C. Zener*, Elasticity and Anelasticity of Metals (Chicago University Press, 1948).
6. *G. Frassati, J. le G. Gilchrist*, 1977, J. Phys. C, 10, L509.
7. *H. W. Kroto*, Molecular Vibration Spectra, Ch. 9 (London: Wiley, 1975).
8. Ref. 16.5, p. 425.
9. *B. Bleaney, R. P. Penrose*, 1947, Proc. Roy. Soc. A189, 358.
10. *J. P. Gordon, H. Z. Zeiger, C. H. Townes*, 1954, Phys. Rev., 95, 282.

# К ГЛАВЕ 19

1. *S. Ch'en, M. Takao*, 1957, Rev. Mod. Phys., 29, 20.  
*H. Margenau, M. Lewis*, 1959, Rev. Mod. Phys., 31, 569.  
*G. Peach*, 1975, Contemp. Phys. 16, 17.  
1981, Ad. in Phys. 30, 367.
2. *D. Bohm*, Quantum Theory, p. 611 (London: Constable, 1951).
3. *J. Stark*, 1914, Ann. Physik, 43, 965.
4. *B. Bleaney, R. P. Penrose*, 1948, Proc. Phys. Soc., 60, 540.
5. *T. W. Hänsch, M. D. Levenson, A. L. Schawlow*, 1971, Phys. Rev. Lett., 26, 946.  
*G. W. Series*, 1974, Contemp. Phys., 15, 49.
6. *B. W. Petley, K. Morris*, 1979, Nature, 279, 141.
7. *A. Abragam*, The Principles of Nuclear Magnetism, p. 58 (Oxford: Clarendon Press, 1961).
8. *B. Golding, M. v. Schickfus, S. Hunklinger, K. Dransfeld*, 1979, Phys. Rev. Lett., 43, 1817.

# К ГЛАВЕ 20

1. Ref. 18.9.
2. Ref. 13.4, p. 358.
3. *M. O. Scully, W. E. Lamb*, 1967, Phys. Rev., 159, 208.
4. Ref. 13.2, p. 79.
5. *D. Kleppner, H. M. Goldenberg, N. F. Ramsey*, 1962, Phys. Rev., 126, 603.
6. *R. F. C. Vessot* in Radio Interferometry Techniques for Geodesy, p. 203 (NASA conference publication 2115, 1980).
7. *R. F. C. Vessot, H. E. Peters*, 1962, I.R.E. Trans. (Instrumentation), 183.

# К ГЛАВЕ 21

1. *A. H. Cook*, Celestial Masers, Ch. 1 (Cambridge University Press, 1977).
2. *D. J. Bradley*, in Ultrashort Light Pulses (ed. Shapiro) p. 17 (Berlin: Springer-Verlag, 1977).
3. *e. g. B. A. Lengyel*, Introduction to Laser Physics (New York: Wiley, 1966).  
*O. Svelto* (tr. D. C. Hanna), Principles of Lasers (New York: Plenum, 1976).
4. *A. H. W. Beck*, Thermionic Valves, Chs 12, 14, 15 (Cambridge University Press, 1953).
5. *I. B. Bott*, 1965, Phys. Lett., 14, 293.
6. *J. H. McFee*, in Physical Acoustics (ed. Mason), Vol. IV A, p. 1 (New York: Academic Press, 1966).
7. *A. R. Hutson, J. H. McFee, D. L. White*, 1961, Phys. Rev. Lett., 7, 236.
8. *G. Weinreich*, 1959, Phys. Rev., 104, 312.



## ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Ансамбль классический эквивалентный 31, 33
- Барьер туннельный 172
- Вибратор ангармонический 40  
— гармонический 8, 21, 27, 36, 42, 61, 215  
— связанный 88  
— изохронный 40  
— классический 16, 27  
— невозмущенный 31  
Возбуждение химическое 232  
Волна де Бройля 73  
— Блоха 77  
Выражение Планка 36  
Высота барьера потенциального 151
- Гамильтониан 67
- Деформация решетки 152  
Диполь Герца 138  
Диссоциация 91, 218  
Диффузия фазы 164, 221  
Дрейф фазы 201
- Закон излучения Планка 102  
Затухание радиационное 134
- Излучение волн 96  
— спонтанное 99, 104, 139  
— стимулированное 190  
Индукция ядерная 181  
Интеграл Фурье 34  
Источник шума квантовый 202
- Квант 11  
Коэффициенты излучения стимулированного 194
- Эйнштейна 102
- Лазер 113, 116  
— полупроводниковый 233  
Лампа бегущей волны 248
- Мазер 116, 159, 162, 188, 192, 196, 197, 222, 223, 227, 235  
Матрица Паули 123  
— плотности 208  
Метод полуклассический 45  
Молекула-резонатор 203  
Момент дипольный 122, 126, 128, 141, 170  
— угловой 163
- Накачка оптическая 229
- Опыт Штерна и Герлаха 17  
Орбиты некруговые 76  
— циклотронные 59, 70  
— электрона свободного 81  
Осциллятор ангармонический 46  
— гармонический 15, 46, 87, 104  
— классический 19  
— с затуханием 209  
— эквивалентный 112, 138  
Осцилляции функции 26  
Отклик импульсный 24, 25, 130, 131, 236, 238  
— пучка молекулярного 192  
Отражение брэгговское 81, 82
- Переходы спонтанные 144  
— стимулированные 144  
Поверхность Ферми 77, 80  
Полиномы Эрмита 13, 18  
Поляризация 198  
Поляризуемость 127  
— статическая 117

- Постоянная времени экспоненциального радиационного затухания 98  
Потенциал ангармонический 65  
— Морзе 51  
Потери резонатора 199  
— релаксационные 149, 150  
Правила квантования Зоммерфельда и Вильсона 48  
— Онзагера 79, 81  
— Планка 48  
— сумм 114

- Разрушение магнитное 80  
Разряд газовый 231  
Распределение вероятности 31  
— импульса 16  
— Максвелла — Больцмана 240  
— потенциала 160  
Резонатор 87  
Релаксация амплитуды 199

- Сдвиг Лэмба 179  
— фазы 170  
Серфинг 234  
Сила Ван-дер-Ваальса 170  
— резонанса 148  
— релаксации 148  
Система гармоническая 29  
— двухуровневая 120, 153  
— квантовая 27  
Скорость дрейфа 247  
— затухания эхосигнала 183  
— лучевая 177  
— потеря энергии 97, 98  
Состояние когерентное 18  
— стационарное 34  
Спектроскопия насыщения 176, 177

- Теорема Эренфеста 23, 37  
Туннелирование квантово-механическое 149, 155

- Уравнение движения молекулы 161  
— Риккати 37  
— Шредингера 11, 13, 16, 24, 25, 28, 41, 59, 61, 71  
— Эйри 15, 51, 55  
Уравнения Блоха 142, 143, 146  
— движения в яме потенциальной двойной 140  
Уровни энергетические 59, 68, 81, 85, 91, 135  
— уширение 91, 92  
Условие нормировки 121

- поляризуемости максимальной 127  
Уширение доплеровское 176  
— линий 162, 174  
— резонансное 168  
— Штарка 168

- Ферми-резонанс 63  
Фигуры Лиссажу 61, 66  
Флуктуации амплитуды 197  
— в мазере 218  
— фазы 197, 201  
Фононы 152  
Формула Планка 145  
Фотоны 152  
Функции отклика 127  
Функция волновая 14, 16, 17, 20, 43, 61, 63, 124, 139  
— Лоренца 177  
— момента дипольного 120  
— отклика импульсного 129, 133  
— Эйри 15, 56  
Фурье-представление 17  
— преобразование 86

- Частота колебаний угловая классическая 11  
— мазера 222  
— фактическая 192  
— перехода молекулярного 192  
— пика релаксационного 152  
— резонансная 193  
— резонатора собственная 192  
— циклотронная 78

## Шумы 202, 216

- Энергия вибратора 100  
— в контуре колебательном 97  
— моде линии передачи 97  
— кинетическая 21, 35  
— осциллятора 19  
— полная 35  
Энергия потенциальная 22, 58, 171  
Эффект магнитно-резистивный 83  
— Штарка 168  
— эха спинного 183  
Эхо спинное 181, 182  
— спонтанное 184  
— стимулированное 184, 185  
— фотонное 185

- Явления критические 29  
Яма потенциальная 45, 50, 56, 91



# ОГЛАВЛЕНИЕ

|                                                                      |     |
|----------------------------------------------------------------------|-----|
| Предисловие редактора                                                | 5   |
| Предисловие                                                          | 7   |
| 13. Квантовый гармонический вибратор и его классические черты        | 8   |
| 13.1. Решение уравнения Шредингера                                   | 11  |
| 13.2. Распределение моментов                                         | 15  |
| 13.3. Нестационарные состояния                                       | 16  |
| 13.4. Когерентное состояние                                          | 18  |
| 13.5. Потенциальная и кинетическая энергии                           | 20  |
| 13.6. Классическое поведение $\langle \xi \rangle$                   | 22  |
| 13.7. Импульсный отклик квантовой системы                            | 24  |
| 13.8. Критические явления                                            | 29  |
| 13.9. Эквивалентный классический ансамбль ( $\sigma$ -представление) | 31  |
| 13.10. Энергия, сообщаемая приложенной силой                         | 35  |
| 13.11. Параметрическое возбуждение                                   | 37  |
| 14. Анггармонические вибраторы                                       | 40  |
| 14.1. Изохронные вибраторы                                           | 40  |
| 14.2. Потенциальная яма произвольной формы. Полуклассический метод   | 45  |
| 14.3. Приближение ВКБ                                                | 53  |
| 15. Колебания и циклотронные орбиты в двумерном случае               | 59  |
| 15.1. Ферми-резонанс: нелинейное связывание                          | 63  |
| 15.2. Циклотронные орбиты                                            | 70  |
| 15.3. Квантование в магнитном поле                                   | 73  |
| 15.4. Квантование некруговых орбит в реальных металлах               | 76  |
| 15.5. Магнитное разрушение                                           | 80  |
| 16. Диссипация, уширение уровней и излучение                         | 87  |
| 16.1. Связанные гармонические вибраторы                              | 88  |
| 16.2. Диссипация и уширение уровней                                  | 91  |
| 16.3. Излучение электромагнитных волн в свободное пространство       | 96  |
| 16.4. Спонтанное излучение в квантовой механике                      | 99  |
| 16.5. Закон излучения Планка. Коэффициенты Эйнштейна                 | 102 |
| 16.6. Расходимость в теории излучения диполя. Увеличение массы       | 107 |
| 17. Эквивалентный классический осциллятор                            | 112 |
| 17.1. Правило $f$ -сумм                                              | 114 |
| 17.2. Статическая поляризуемость                                     | 117 |
| 18. Двухуровневая система                                            | 120 |
| 18.1. Общая теория                                                   | 121 |
| 18.2. Модель двух потенциальных ям                                   | 124 |
| 18.3. Функции отклика                                                | 127 |
| 18.4. Радиационное затухание в двухуровневой системе                 | 134 |

|                                                                                   |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 18.5. Уравнения движения в двойной потенциальной яме с затуханием                 | 140 |
| 18.6. Стимулированные и спонтанные переходы                                       | 144 |
| 18.7. Восприимчивость, зависящая от частоты                                       | 146 |
| 18.8. Диэлектрические потери в полиэтилене — пример релаксации при туннелировании | 149 |
| 18.9. Другие примеры двухуровневых систем. Аммиак                                 | 153 |
| 19. Уширение линий                                                                | 162 |
| 19.1. Диффузия фазы                                                               | 164 |
| 19.2. Уширение Штарка и резонансное уширение                                      | 168 |
| 19.3. Доплеровское уширение. Спектроскопия насыщения                              | 176 |
| 19.4. Спиновое эхо и связанные с ним эффекты                                      | 180 |
| 20. Мазер на аммиаке                                                              | 188 |
| 20.1. Стимулированное излучение                                                   | 190 |
| 20.2. Диэлектрический отклик молекулярного пучка                                  | 192 |
| 20.3. Флуктуации амплитуды и фазы                                                 | 197 |
| 20.4. Квантовая теория взаимодействия молекула — резонатор                        | 203 |
| 20.5. Наглядное представление матрицы плотности                                   | 208 |
| 20.6. Гармонический осциллятор с затуханием                                       | 209 |
| 20.7. Диссипация и флуктуации в мазере                                            | 218 |
| 20.8. Измерение частоты мазера                                                    | 222 |
| 20.9. Мазер как стандарт частоты                                                  | 223 |
| 21. Мазеры. От лазера до лампы бегущей волны                                      | 227 |
| 21.1. Механизмы инверсии заселенностей                                            | 229 |
| 21.2. Классический подход к процессам в мазере                                    | 235 |
| 21.3. Электронный циклотрон                                                       | 235 |
| 21.4. Модулирование пучка по плотности и работа мазера                            | 240 |
| 21.5. Затухание и усиление акустических волн в твердых телах                      | 245 |
| 21.6. Лампа бегущей волны                                                         | 248 |
| 21.7. К्लीстрон                                                                   | 249 |
| Заключение                                                                        | 256 |
| Литература                                                                        | 257 |
| Указатель                                                                         | 260 |