

В. В. ШТЫКОВ

КВАНТОВАЯ РАДИОФИЗИКА

Рекомендовано

Учебно-методическим объединением по образованию в области радиотехники, электроники, биомедицинской техники и автоматизации в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению подготовки «Радиотехника» специальности 210301 «Радиофизика и электроника»



Москва
Издательский центр «Академия»
2009

УДК 537.86(075.8)
ББК 32.86я73
Ш948

Рецензенты:

проф. кафедры радиофизики СПбГПУ, д-р физ-мат. наук *О. И. Котов*;
зав. кафедрой радиосистем Новгородского государственного университета
им. Ярослава Мудрого, д-р техн. наук, проф. *Л. А. Рассветалов*

Штыков В.В.

Ш948 Квантовая радиофизика : учеб. пособие для студ. высш. учеб. заведений / В.В. Штыков. — М. : Издательский центр «Академия», 2009. — 336 с.

ISBN 978-5-7695-5311-0

Рассмотрены фундаментальные вопросы линейного и нелинейного взаимодействий электромагнитного поля с различными средами, электрические и магнитные свойства вещества. Изложены элементы теории колебаний квантовых генераторов, описаны основные типы квантовых генераторов и усилителей. Представлены фундаментальные основы нелинейной оптики.

Для студентов высших учебных заведений.

УДК 537.86(075.8)
ББК 32.86я73

Оригинал-макет данного издания является собственностью Издательского центра «Академия», и его воспроизведение любым способом без согласия правообладателя запрещается

© Штыков В.В., 2009
© Образовательно-издательский центр «Академия», 2009
© Оформление. Издательский центр «Академия», 2009

ISBN 978-5-7695-5311-0

ПРЕДИСЛОВИЕ

Конец 40-х и начало 50-х гг. XX в. ознаменованы стремительным внедрением в повседневную практику достижений фундаментальных научных исследований. Результаты такого внедрения говорили о том, что развитие радиоэлектроники будет связано с постоянным использованием самых «свежих» идей фундаментальной науки. Эти ожидания полностью оправдались.

Современную радиоэлектронику невозможно представить без полупроводниковых приборов, квантовых генераторов, оптоэлектронных устройств. На повестке дня уже стоит применение нанотехнологий. Возможно, скоро дело дойдет и до использования белковых молекул.

Для успешной работы в таких условиях требуются инженеры, способные воспринять идеи, которые совсем недавно были делом только «чистых» теоретиков. В случае необходимости они должны быть готовы провести собственные теоретические и экспериментальные исследования физических явлений. Для подготовки таких специалистов в 1955 г. по инициативе академика В.А. Котельникова на радиотехническом факультете (РТФ) МЭИ была открыта специальность «Радиофизика и электроника» с углубленной физико-математической подготовкой. Это позволило уже в 1961 г. начать на факультете работы в области квантовой электроники, а в 1963 г. представить к защите первые дипломные проекты по данной тематике. Впоследствии выпускники РТФ МЭИ активно включились в работы по квантовой электронике в отраслевых НИИ и институтах Академии наук.

Основу книги составил материал лекций, которые были прочитаны автором в разные годы на радиотехническом факультете МЭИ студентам специальности «Радиофизика и электроника». Название учебной дисциплины несколько раз менялось, пока не приобрело современный вид.

Во всех вариантах подобных курсов рассматривались фундаментальные аспекты линейного и нелинейного взаимодействий электромагнитного поля с материальной средой.

Материал книги базируется на общих естественно-научных и математических дисциплинах в объеме учебных программ вуза, а также на курсах общепрофессиональных и специальных дисциплин.

лин — электродинамики, теории радиотехнических цепей и сигналов, теории колебаний и т.д.

Автор надеется, что эта книга поможет студентам радиотехнических и радиофизических специальностей успешно преодолеть разрыв между дисциплинами естественно-научного цикла и специальными дисциплинами.

При подготовке книги к изданию большое число людей оказали автору неоценимую помощь. Он искренне благодарит своих коллег по радиотехническому факультету МЭИ за постоянное внимание к его работе, ценные обсуждения и неизменную поддержку.

В.1. Предмет квантовой радиофизики

В энциклопедической литературе квантовая радиофизика отождествляется с квантовой электроникой. Последняя определяется как научно-техническое направление, связанное с исследованием методов усиления, генерации и преобразования электромагнитных волн в диапазоне от единиц мегагерц до сотен терагерц с использованием вынужденных квантовых переходов или нелинейного взаимодействия излучения с веществом.

Квантовая электроника зародилась в недрах радиоспектроскопии, которая начала бурно развиваться в конце 40-х гг. XX в. В то время физики-экспериментаторы получили в свое распоряжение достаточно богатый арсенал устройств СВЧ-диапазона. Благодаря этому были проведены обширные исследования спектров поглощения молекул в миллиметровом и сантиметровом диапазонах электромагнитных волн. Именно эти исследования попутно привели к созданию первого квантового генератора. Уже более полувека отделяет нас от того момента.

За прошедшее время область исследований квантовой электроники расширилась настолько, что термин квантовая радиофизика теперь кажется уже более уместным. Возможно, что уже в недалеком будущем радиоинженерам придется заняться нанoeлектроникой. Тогда исследование взаимодействия электромагнитных полей с наноструктурами станет неотъемлемой частью квантовой радиофизики.

На фоне быстрого научно-технического прогресса предметом квантовой радиофизики как учебной дисциплины остается изучение взаимодействия излучения с веществом в условиях, когда необходимо использовать квантовые постулаты. Поэтому ее основу составляют квантовая теория, классическая электродинамика и теория колебаний. Этого достаточно для решения большинства прикладных задач. Однако при решении некоторых проблем классическая электродинамика должна уступить место квантовой.

В.2. Историческая справка

В 1916 г. А. Эйнштейн первым обосновал возможность существования индуцированного (вынужденного) излучения и указал

на его когерентность. В 1923 г. П. Эренфест подтвердил его выводы. В 1927—1933 гг. П. Дирак создает квантово-механическую теорию вынужденного излучения. Условия обнаружения вынужденного излучения и пути его реализации были сформулированы Р. Ладенбургом и Г. Копфеманом (Германия) в 1928 г. В 1939 г. В. А. Фабрикант¹ впервые наблюдал и исследовал усиление света при пропускании его через плазму газового разряда. Вынужденное излучение в виде коротких радиоимпульсов впервые обнаружили американские физики Е. Парселл и Р. Паунд в 1950 г.

В 1951 г. В. А. Фабрикант с сотрудниками подал авторскую заявку на способ усиления электромагнитного излучения путем прохождения усиливаемого излучения через среду с инверсной населенностью. К сожалению, эта заявка была опубликована только в 1959 г. и никакого влияния на ход работ по созданию квантовых генераторов оказать не смогла.

Квантовая электроника начала свое существование как научно-техническое направление только с конца 1954 г. Именно тогда были заложены ее теоретические основы, а также создан первый квантовый прибор — молекулярный генератор.

Какие же причины препятствовали созданию квантовых приборов значительно раньше? Для того чтобы выяснить это, коротко напомним принципы, на которых базируется квантовая электроника.

Как было упомянуто ранее, явление индуцированного излучения было введено в теорию А. Эйнштейном. Чтобы описать термодинамическое равновесие между полем и атомами, он предположил, что атом, находящийся в возбужденном состоянии, может отдать свою энергию в виде излучения (кванта) двумя путями.

Первый путь — это спонтанное излучение, когда атом самопроизвольно излучает энергию. До появления квантовой механики явление спонтанного излучения описывалось исходя из классических представлений. Атом рассматривался как осциллятор с трением, амплитуда колебаний которого убывает со временем. Все традиционные оптические источники дают свет благодаря спонтанному излучению. Поэтому явление спонтанного излучения уже давно было известно ученым, работавшим в области оптической спектроскопии.

¹ В. А. Фабрикант (1907—1991) — доктор физико-математических наук, профессор. Действительный член АПН СССР, лауреат Государственной премии СССР. В 1930 г. по рекомендации С. И. Вавилова начал преподавать на кафедре физики МЭИ, которой заведовал с 1943 по 1977 г. За свою педагогическую и научную работу В. А. Фабрикант был награжден двумя орденами Трудового Красного Знамени, двумя орденами «Знак Почета», двумя золотыми медалями имени С. И. Вавилова. В 1992 г. ученый совет МЭИ присвоил кафедре физики имя В. А. Фабриканта.

Второй путь, которым атом может отдать свою энергию, — это индуцированное излучение. Явление индуцированного излучения заключается в том, что если возбужденный атом взаимодействует с внешним полем, то в результате появляются два неразличимых кванта с одинаковыми частотами (энергиями) и волновыми векторами (импульсами). В 1927 г. на это важное свойство индуцированного излучения впервые указал П. Дирак.

Совершенно ясно, что если все атомы будут находиться в возбужденном состоянии, то такая система частиц будет усиливать излучение. Нет сомнения в том, что некоторые ученые понимали это еще в конце 30-х гг. XX в., однако никто не указал на возможность создания генераторов света. Оптические квантовые генераторы в принципе могли быть созданы уже тогда, но открытие В. А. Фабриканта прошло незамеченным. Основная причина заключалась в отсутствии практической потребности в таких генераторах. В те годы радиоэлектроника только-только начинала осваивать дециметровые и сантиметровые волны.

Лишь после окончания Второй мировой войны, когда начала бурно развиваться радиоспектроскопия, появились реальные предпосылки для создания квантовых генераторов. Именно ученые, работавшие в области радиоспектроскопии, заложили основы квантовой электроники. Это связано с рядом благоприятных обстоятельств, которых не было у ученых, работавших в области оптической спектроскопии.

Для того чтобы выяснить суть различия оптического и СВЧ диапазонов составим уравнение баланса двухуровневой квантовой системы. Пусть населенность нижнего уровня равна n_1 , а верхнего — n_2 . Переходы вниз $2 \rightarrow 1$ обусловлены спонтанным и вынужденным процессами, а вверх $1 \rightarrow 2$ — только вынужденным. В стационарном состоянии в единицу времени число переходов вниз равно числу переходов вверх:

$$n_2(A_{21} + B_{21}u) = n_1B_{12}u, \quad (\text{В.1})$$

где A_{21} — вероятность спонтанных переходов; B_{12} , B_{21} — коэффициенты Эйнштейна, $B_{12} = B_{21}$; u — спектральная плотность энергии излучения, Дж · с · м⁻³; $B_{12}u$ — вероятность вынужденных переходов.

Равенство (В.1) позволяет установить связь между вероятностями перехода в следующем виде:

$$A_{21} = B_{12}u(n_1/n_2 - 1).$$

В условиях теплового равновесия распределение частиц по уровням подчиняется закону Больцмана

$$n_2 = n_1 \exp(\hbar\omega_{21}/(k_B T)),$$

и, следовательно,

$$A_{21} = B_{12}u(\exp(\hbar\omega_{21}/(k_B T)) - 1).$$

В оптическом диапазоне $\hbar\omega_{21}/(k_B T) \gg 1$, а в СВЧ — $\hbar\omega_{21}/(k_B T) \ll 1$. Таким образом, при одинаковой плотности энергии в оптическом диапазоне преобладают спонтанные переходы ($A_{21} > B_{12}u$), а в СВЧ — вынужденные ($A_{21} < B_{12}u$). Поэтому в области оптической спектроскопии нет нужды учитывать индуцированное излучение.

В 50-х гг. XX в. физики, работавшие в области микроволновой радиоспектроскопии, стали использовать молекулярные пучки для увеличения разрешающей способности и чувствительности радиоспектроскопов. С уменьшением давления газа спектральные линии поглощения сужаются, но их интенсивность уменьшается. Ее можно увеличить, если большая часть молекул будет находиться либо в нижнем, либо в верхнем состоянии. Очевидно, что если молекулы находятся в верхнем состоянии, то такая система способна усиливать излучение.

Как известно, всякий усилитель можно превратить в автогенератор. Для этого нужна обратная связь. Теория обычных генераторов радиодиапазона хорошо разработана. Для их описания вводится, например, понятие отрицательного сопротивления. Квантовые генераторы — это распределенные в пространстве системы. Для описания таких генераторов используется понятие отрицательной удельной проводимости среды. Условие самовозбуждения заключается в выполнении требования компенсации потерь в объемном резонаторе, который в совокупности с активной средой и образует квантовый генератор.

В 1953 г. профессор Мерилендского университета Дж. Вебер опубликовал небольшую статью, в которой показал, что если бы удалось каким-либо способом инвертировать распределение населенностей энергетических уровней, то можно было бы реализовать совершенно новый метод усиления сигналов. Это была первая открытая публикация, хотя еще в 1951 г. подобный вопрос обсуждался рядом специалистов.

В 1954 г. Д. Гордону, К. Таунсу и Х. Цайгеру из Колумбийского университета, а также Н. Г. Басову¹ и А. М. Прохорову² из физи-

¹ Н. Г. Басов (1922—2001) — советский физик, один из основоположников квантовой электроники. В 1964 г. был удостоен Нобелевской премии. Выдвинул в 1959 г. идею применения полупроводников для квантовых генераторов оптического диапазона и развил методы создания различных типов полупроводниковых лазеров. Выполнил ряд работ по теории мощных импульсных лазеров на рубине и неодимовом стекле, по созданию квантовых стандартов частоты, взаимодействию мощного излучения с веществом.

² А. М. Прохоров (1916—2002) — советский физик, один из основоположников квантовой электроники. В 1964 г. был удостоен Нобелевской премии. Почетный член Американской академии наук и искусств. В 1969 г. был назначен главным редактором Большой Советской Энциклопедии, почетный профессор университетов Дели (1967 г.) и Бухареста (1971 г.). Находясь на посту заместителя директора Физического института АН СССР им. П. Н. Лебедева с 1973 г., продолжал исследования по физике лазеров, в том числе по их применению для изучения многоквантовых процессов и термоядерного синтеза.

ческого института АН СССР удалось независимо друг от друга осуществить усиление и получить генерацию на частоте 23,867 ГГц, используя пучок молекул аммиака. Созданное ими устройство назвали мазером (аббревиатура английского термина Microwave Amplification by Stimulated Emission of Radiation — микроволновое усиление с помощью индуцированного излучения). За эту работу Ч.Таунс, Н.Г.Басов и А.М.Прохоров были удостоены Нобелевской премии по физике (1964 г.).

В 1956 г. Н. Бломберген предложил способ создания инверсии, основанный на использовании дополнительного излучения (его назвали излучением накачки), что позволило перейти к использованию в квантовых усилителях и генераторах твердого тела вместо газа. Число работ в этой области физики стало быстро расти. Были созданы практические устройства с использованием явления электронного парамагнитного резонанса.

В 1958 г. А. Шавлов и К. Таунс опубликовали статью под названием «Infrared and Optical Masers», а в 1960 г. Т. Майман практически реализовал их идею, создав импульсный оптический квантовый генератор (ОКГ) на монокристалле рубина. Это произвело ошеломляющее впечатление не только в научных кругах, но и в целом в мире благодаря освещению в средствах массовой информации. Хотя ясно, что все шло вполне эволюционным путем. Просто количество (частота генерации) перешло в новое качество (когерентный источник света).

Примерно через год А. Джаван сообщил о получении непрерывной генерации с использованием газового разряда в смеси гелия и неона. Число работ, семинаров и конференций по ОКГ стало расти, как снежный ком. За короткий срок было создано большое число разнообразных ОКГ. В это время за ними закрепилось название «лазер» (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation — усиление света вынужденным излучением).

Появление лазеров оказало существенное влияние на развитие естественных наук и общества в целом. Лучшие научные силы были привлечены к работам в области когерентной оптики. Были инициированы исследования, направленные на разработку совершенно новой элементной базы (фотоприемников, модуляторов, дефлекторов и т. п.) и новых систем (оптических локаторов, систем связи и навигации и т. д.).

Создание лазеров сопоставимо по своему значению с созданием транзисторов. Достаточно сказать, что без квантовых генераторов невозможно было бы появление современных информационных технологий.

К настоящему моменту квантовые генераторы работают в диапазоне приблизительно от 200 нм до 0,5 мм. Выходная мощность в непрерывном режиме достигает сотен киловатт, а в импульсном — нескольких гигаватт.

В.3. Методическая концепция книги

Бурное развитие квантовой электроники началось в 1960 г. и вскоре на отечественном книжном рынке стала появляться литература, посвященная квантовым генераторам и усилителям. Однако издания первых лет нельзя было использовать в качестве учебных пособий для подготовки инженеров. На то было несколько причин.

Основная причина заключалась в том, что изложение теории лазеров первоначально базировалось на понятиях спонтанных и вынужденных переходов как элементарных актов обмена энергией между полем и средой. Это позволяло, основываясь на понятиях вероятности перехода в единицу времени, получить балансные уравнения для населенностей энергетических уровней в присутствии электромагнитного поля и источника накачки. В некоторых случаях в балансные уравнения включались и фотоны (уравнения Статца—де Марса, 1960 г.). Однако при использовании метода балансных уравнений полностью теряются фазовые соотношения. Поэтому такие важные технические характеристики квантового генератора, как частота колебаний, конфигурация поля, модовый состав и ряд других, не поддавались описанию и расчету.

В микроволновом диапазоне ситуация складывалась иначе. Теория лазера вполне естественным образом опиралась на классическую электродинамику. Свойства среды описывались макроскопическими наблюдаемыми величинами (поляризацией, намагниченностью, плотностью тока), которые находились путем усреднения микроскопических величин по ансамблю частиц. Задача о квантовом генераторе сводилась к решению уравнений Максвелла. Используемый полуклассический метод оказался очень плодотворным.

Полуклассическое приближение составляет методическую основу настоящей книги. Это означает, что для описания взаимодействия электромагнитного поля с веществом используются классические уравнения Максвелла:

$$\begin{aligned}\operatorname{rot} \mathbf{H} &= \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t}; \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\mu_0 \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{H} + \mathbf{M}),\end{aligned}$$

а свойства вещества описываются векторами поляризации и намагниченности, которые связаны с полями \mathbf{E} и \mathbf{H} через некоторые, в общем случае нелинейные, интегродифференциальные операторы:

$$\mathbf{P} = \hat{P}(\mathbf{E}, \mathbf{H});$$

$$\mathbf{M} = \widehat{M}(\mathbf{E}, \mathbf{H}).$$

Конкретная форма этой связи всегда устанавливается на основе некоторых исходных постулатов. В квантовой электронике в качестве таковых необходимо использовать квантовые постулаты. Поэтому книга содержит основные теоретические сведения о внутренней структуре вещества и математическом аппарате квантовой механики (гл. 1).

Формализм матрицы плотности (гл. 1) позволяет совершить переход от микроскопических (квантовых) величин к макроскопическим (классическим). В результате появляются материальные уравнения, описывающие реакцию вещества на электромагнитное поле в виде поляризации (гл. 2), намагниченности (гл. 3) и тока (гл. 4). Эти уравнения совместно с уравнениями Максвелла образуют полную систему уравнений, достаточную для решения широкого класса задач о линейном и нелинейном взаимодействиях электромагнитного поля с веществом. В частности, с достаточной степенью точности удастся найти параметры квантового генератора и описать динамику установления колебаний (гл. 5). Нелинейный характер материальных уравнений определяет параметры стационарного режима квантового генератора (гл. 5), а также проявляется в генерации гармоник при распространении лазерного излучения в различных средах (гл. 6).

Многие задачи квантовой радиофизики в том или ином смысле имеют аналоги в таких традиционных дисциплинах радиотехнического профиля, как «Основы теории цепей», «Электродинамика», «Теория колебаний» и т. д. При изложении подобные аналогии сопровождаются соответствующими ссылками. Это должно облегчить восприятие материала.

Освоение любой учебной дисциплины нельзя считать полным и глубоким, если процесс ее изучения не сопровождается решением задач. Поэтому в книгу включены и задачи. Отдельные из них формулируются в виде некоторой проблемы. Решение таких задач потребует внимательного изучения материала соответствующих разделов книги. Есть задачи, которые требуют использования компьютера. Для их решения будет достаточно популярного среди студентов математического пакета MathCAD. Обращение к современным вычислительным средствам позволяет использовать при формулировании условий задачи более точную модель объекта. Из изложенного следует, что большинство задач, включенных в книгу, ориентировано, скорее, на решение дома, чем в аудитории. Хорошим подспорьем при изучении предмета будут сборники задач [29], [21]. Задачи по теме книги можно найти в [17, 23, 24, 26, 33—35]. Нелишне также освежить в памяти задачи традиционных радиотехнических дисциплин.

ЭККУРС В АТОМНО-МОЛЕКУЛЯРНУЮ ТЕОРИЮ ВЕЩЕСТВА

1.1. Вступление. Корпускулярно-волновой дуализм

Как известно, вещество состоит из молекул и атомов. В зависимости от характера и силы взаимодействия между атомами и молекулами вещество пребывает в одном из агрегатных состояний: газообразном, жидком или твердом. Квантовая электроника имеет дело со всеми этими состояниями. Мы рассмотрим их в порядке нарастания степени взаимодействия между частицами. Начнем с изолированного атома.

Из курса общей физики читатель уже знает, когда и на основе каких экспериментов исследователи пришли к современной физической картине мира. Мы же постараемся изложить систематически те минимальные сведения, которые необходимы для понимания предмета книги.

Итак, общепризнанным является то, что и веществу, и полю присуща двойственная природа. С одной стороны, переменное электромагнитное поле в простейшем случае имеет вид плоской волны с электрическим вектором

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \operatorname{Re}\{\dot{\mathbf{E}}_0 \exp[j(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})]\}. \quad (1.1)$$

Здесь \mathbf{k} — волновой вектор, $|\mathbf{k}| = k = 2\pi/\lambda = \omega/c$, где λ — длина волны; ω — частота; c — скорость света в вакууме, примерно равная $3 \cdot 10^8$ м/с. В то же время электромагнитное поле квантуется и в определенных условиях проявляет себя, как частицы, обладающие импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ и энергией $W = \hbar\omega$ ($\hbar = h/2\pi$, где h — постоянная Планка¹, $h \approx 6,62 \cdot 10^{-34}$ Дж·с).

С другой стороны, в соответствии с блестяще подтвердившейся гипотезой де Бройля, частице вещества, имеющей импульс \mathbf{p} и энергию W , также можно приписать некоторую частоту ω и волновой вектор \mathbf{k} , такие что

¹ М. Планк (1858—1947) — немецкий физик, основоположник квантовой теории, иностранный член-корреспондент Петербургской АН и почетный член АН СССР. В 1918 г. получил Нобелевскую премию. Германское физическое общество назвало свою высшую награду медалью Планка. Был великолепным пианистом (выступал с оркестром), увлеченным альпинистом.

$$\omega = \frac{W}{\hbar}; \quad (1.2)$$

$$k = \frac{p}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda_B}, \quad (1.3)$$

где λ_B — длина волны де Бройля¹, $\lambda_B = \frac{2\pi\hbar}{mv}$.

Тогда в простейшем случае частице вещества будет соответствовать плоская волна, описываемая выражением²

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_0 \exp \left[j \left(\frac{\mathbf{p}}{\hbar} \mathbf{r} - \frac{W}{\hbar} t \right) \right]. \quad (1.4)$$

Смысл волновой функции $\psi(\mathbf{r}, t)$ заключается в том, что $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \Delta \mathbf{r} \Delta t = \psi(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t)^* \Delta \mathbf{r} \Delta t$ есть вероятность обнаружить частицу в окрестности $\Delta \mathbf{r} \Delta t$ точки с координатами \mathbf{r}, t . Таким образом, траекторию движения частицы можно трактовать, строго говоря, лишь в вероятностном смысле, а сама частица должна рассматриваться как объект, принадлежащий некоторому статистическому ансамблю.

Вещество проявляет квантовые свойства в том случае, когда характерный размер взаимодействующей с полем частицы оказывается сопоставимым с длиной волны де Бройля. Рассмотрим в качестве примера тепловое движение атома водорода (его масса $m = 1,7 \cdot 10^{-27}$ кг). При тепловом движении средняя кинетическая энергия $p^2/(2m) \approx k_B T$ ($k_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К — постоянная Больцмана). При $T \approx 300$ К имеем $p \approx 4 \cdot 10^{-24}$ Дж · с/м, а $\lambda = h/p \approx 2 \cdot 10^{-10}$ м, что сопоставимо с размером атома водорода $r_0 \approx 5 \cdot 10^{-10}$ м. Отсюда можно заключить, что при описании взаимодействия поля с веществом последнее все же придется рассматривать с позиций квантовой механики.

1.2. Постулаты квантовой механики

Упомянутая ранее гипотеза де Бройля явилась важной предпосылкой создания квантовой механики, которая представляет со-

¹ Л. де Бройль (1892—1987) — французский физик, один из основателей квантовой механики. В 1929 г. получил Нобелевскую премию. Иностраннный член АН СССР. В 1933 г. был избран членом Французской академии наук. Основал Центр исследований по прикладной математике при Институте Анри Пуанкаре для укрепления связей между физикой и прикладной математикой.

² В физике по традиции используется множитель $e^{-j\omega t}$, в технических дисциплинах — $e^{j\omega t}$. На конечных результатах это не сказывается, так как $\text{Re}(e^{\pm j\omega t}) = \cos(\omega t)$.

бой столь же стройное сооружение из аксиом и теорем, как и геометрия Евклида¹. Существует несколько различных формулировок квантовой механики. Мы будем придерживаться наиболее распространенной из них, основанной на уравнении Шредингера² и гамильтоновом формализме. Итак, аксиомы (постулаты) квантовой механики можно сформулировать следующим образом.

Постулат первый. Каждое состояние физической системы полностью описывается волновой функцией $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_i, \dots, \mathbf{r}_n, t)$, где \mathbf{r}_i — i -я координата составляющих физическую систему частиц. Из физического смысла ψ -функции следует условие нормировки

$$\int \psi^* \psi d\mathbf{r} = 1.$$

В качестве аргументов волновой функции не обязательно должны выступать пространственные координаты и время. Однако в любом случае это обязательно должны быть величины, которые одновременно можно точно измерить³. Как известно, \mathbf{r} и \mathbf{p} в соответствии с принципом неопределенности одновременно точно измерить нельзя, поэтому их нельзя рассматривать вместе как аргументы ψ -функции.

Постулат второй. Каждой наблюдаемой в физической системе величине соответствует некоторый линейный оператор. Этот постулат нуждается в кратком комментарии.

Наблюдаемыми величинами являются: координата x , составляющая импульса p_x , энергия W , электрическое поле \mathbf{E} , магнитное поле \mathbf{H} , электрическая индукция \mathbf{D} и т. д. Оператором называется правило, в соответствии с которым одна функция преобразуется в другую.

Оператор \hat{A} называется линейным, если он удовлетворяет принципу суперпозиции

$$\hat{A}(u_1 + u_2) = \hat{A}u_1 + \hat{A}u_2; \quad \hat{A}(cu) = c\hat{A}u,$$

где c — произвольная константа.

¹ Евклид (ок. 365 — ок. 300 до н. э.) — древнегреческий математик. Работал в Александрии. Его главный труд «Начала» (15 книг) содержит изложение планиметрии, стереометрии, ряда вопросов теории чисел, алгебры, общей теории отношений и метода определения площадей и объемов, включающего элементы пределов (метод исчерпывания).

² Э. Шредингер (1887—1961) — австрийский физик-теоретик, один из основателей квантовой теории. Иностранный почетный член АН СССР. В 1933 г. был удостоен Нобелевской премией. Награжден медалью Макса Планка Германского физического общества.

³ О возможности одновременного измерения физических величин речь пойдет далее.

Согласно данному постулату координате \mathbf{r} соответствует оператор $\hat{\mathbf{r}}$, импульсу \mathbf{p} — оператор $\hat{\mathbf{p}}$, энергии W — оператор \hat{W} (полной энергии соответствует оператор Гамильтона \hat{H}) и т.д. Все эти операторы обязаны быть линейными, но правила нахождения их вида постулат не дает.

Вспомним некоторые сведения из алгебры операторов. Пусть есть уравнение

$$\hat{A}u = Au, \quad (1.5)$$

где A — некоторая константа. Ненулевые решения этого уравнения существуют лишь для некоторых $A = A_n$, и для каждого A_n имеет место тождество

$$\hat{A}u_n = A_n u_n.$$

Совокупность $\{A_n\}$ называется собственными значениями оператора \hat{A} , а $\{u_n\}$ — его собственными функциями. Спектр собственных значений и собственных функций может быть дискретным или непрерывным.

Постулат третий. Единственно возможным результатом измерения физической величины A является одно из собственных значений оператора этой величины \hat{A} .

В отличие от классической физики квантовая механика допускает получение не только непрерывного, но и дискретного спектра результатов измерения (например, спектра энергии атома водорода).

Как следует толковать этот постулат? Пусть атом находится в состоянии, описываемом функцией ψ . Измерим его энергию и получим значение W_1 . В результате взаимодействия с измерительным прибором атом переходит в состояние, описываемое собственной функцией оператора ψ_1 . Вернем атом в прежнее состояние ψ и повторим измерение. В результате получим значение W_2 и новое состояние ψ_2 . Вероятностная природа квантовой механики является следствием неконтролируемого взаимодействия объектов микромира.

Если при повторных измерениях величины A каждый раз получается один и тот же результат A_k , то говорят, что величина A точно измерима. Если это не так, то при многократных измерениях случайным образом будем получать разные результаты. Возникает вопрос, каково среднее значение $\langle A \rangle$ наблюдаемой величины.

Постулат четвертый. Если физическая система находится в состоянии ψ , то среднее значение наблюдаемой величины A равно

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi d\mathbf{r}, \quad (1.6)$$

где $d\mathbf{r}$ — элемент объема в выбранной системы координат, например dx, dy, dz .

Если ψ — функция координат, то интегрировать надо по всему пространству координат. Иногда используется запись (1.6) в форме скалярного произведения $(u, v) = \int u^* v d\mathbf{r}$:

$$\langle A \rangle = (\psi | \hat{A} \psi).$$

Часто в литературе по физике используются обозначения Дирака:

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle,$$

где $\langle \psi |$ — бра-вектор; $|\psi\rangle$ — кет-вектор.

Смысл этих обозначений прояснится позднее.

Таким образом, располагая ψ -функцией системы, мы знаем среднее значение любой наблюдаемой в ней величины. Следовательно, волновая функция исчерпывающе описывает физическую систему. Возникает вопрос: «Если мы знаем $\psi(t_0)$, а измерение проводим в момент времени t_1 , то как нам найти $\psi(t_1)$?»

Постулат пятый. Поведение физической системы во времени описывается уравнением Шредингера:

$$j\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad (1.7)$$

где \hat{H} — оператор полной энергии (*гамильтониан системы*).

Не стоит пытаться доказать уравнение Шредингера. Это так же бессмысленно, как доказывать уравнения Максвелла¹. Уравнение Шредингера — просто гипотеза, которая позволяет рассчитывать поведение микроскопических систем.

Приведенные постулаты составляют формальную основу квантовой механики, выводы которой прекрасно подтверждаются практикой. Остается лишь смириться с возможным их противоречием здравому смыслу.

¹ Д. К. Максвелл (1831—1879) — английский физик, создатель классической электродинамики. Основатель и первый директор знаменитой Кавендишской лаборатории. Известен разносторонними исследованиями в различных областях физики. В исследованиях по молекулярно-кинетической теории газов впервые решил статистическую задачу о распределении молекул идеального газа по скоростям, открыл явление двойного лучепреломления в потоке. Был крупным популяризатором науки.

1.3. Свойства операторов наблюдаемых величин

Вид операторов некоторых наблюдаемых величин. Вид операторов наблюдаемых величин постулируется так, чтобы теоретические результаты совпадали с данными экспериментов. Воспользуемся некоторыми наводящими соображениями. Если $|\psi(\mathbf{r})|^2$ есть плотность вероятности найти частицу в окрестности точки \mathbf{r} , то

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r}.$$

Из сравнения этого выражения с (1.6) следует, что оператор координаты есть сама координата:

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}. \quad (1.8)$$

Если посмотреть на волновую функцию частицы со строго определенным импульсом \mathbf{p} , то становится ясно, что $|\psi|^2 = \text{const}$ [см. формулу \mathbf{p} (1.4)], т. е. частица не локализована в пространстве (рис. 1.1, *а*). Локализованной в направлении x частице соответствует волновой пакет (или группа волн) (рис. 1.1, *б*), состоящий из

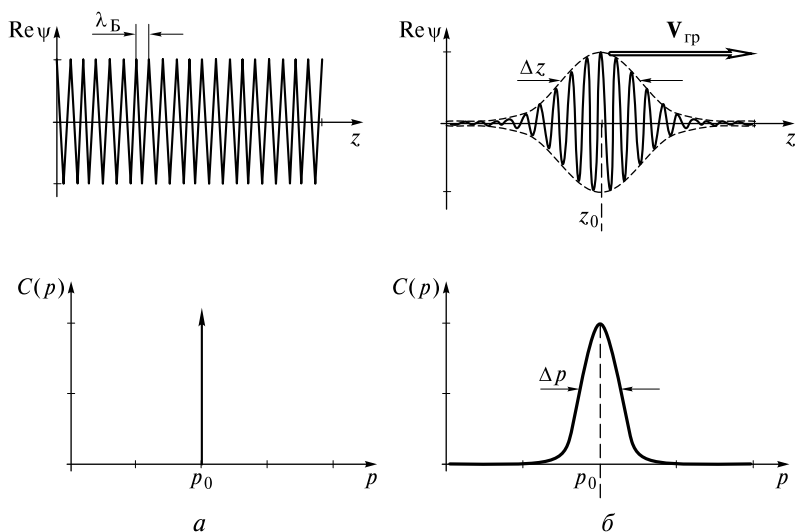


Рис. 1.1. Вид волновых функций в координатном и импульсном пространствах для частицы с определенным значением импульса (*а*) и группы волн (*б*). Огибающая пакета волн движется в пространстве с групповой

скоростью $v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dW}{dk}$, которая является аналогом классической скорости частицы. Понятия «группа волн» и «групповая скорость» используются также в теории сигналов и электродинамике

набора плоских волн с разными волновыми числами (разными импульсами):

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(p_x) e^{j\frac{p_x}{\hbar}x} e^{-j\frac{W}{\hbar}t} dp_x, \quad (1.9)$$

где $C(p_x)$ — фурье-образ ψ -функции, смысл которого состоит в том, что $|C|^2$ — это плотность вероятности обнаружить частицу с импульсом p_x .

Мы уже не имеем права утверждать, что преобразование (1.9) описывает частицу с определенным импульсом p_x , но без труда можем найти среднее значение ее импульса

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} C^*(p_x) p_x C(p_x) dp_x.$$

В то же время согласно уравнению (1.6)

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) p_x \psi(x) dx.$$

Учитывая, что преобразование Фурье от $p_x C(p_x)$ есть $-j\hbar \partial\psi/\partial x$, и сопоставляя оба приведенных ранее выражения, получаем

$$\hat{p}_x = -j\hbar \frac{\partial}{\partial x},$$

а в трехмерном случае

$$\hat{\mathbf{p}} = -j\hbar \nabla.$$

Предлагаем читателю самостоятельно доказать, что если в классической физике некоторая наблюдаемая величина A является функцией координат и импульсов, т.е. $A = f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, то соответствующий ей квантовый оператор

$$\hat{A} = f(\mathbf{r}, -j\hbar \nabla). \quad (1.10)$$

Из уравнения (1.10) следует, например, что оператор потенциальной энергии $\hat{W}_{\text{пот}}(\mathbf{r})$ есть сама эта энергия, а оператор кинетической энергии равен $-\hbar^2/(2m)\nabla^2$. Вид некоторых операторов приведен в табл. 1.1.

Свойства собственных функций операторов наблюдаемых величин. Поскольку все наблюдаемые величины должны описываться действительными числами, то в соответствии с третьим постула-

Операторы наблюдаемых величин в координатном представлении

Наблюдаемая величина	Обозначение	Оператор
Координата	\mathbf{r}	\mathbf{r}
Импульс	\mathbf{p}	$-j\hbar\nabla$
Кинетическая энергия	$W_{\text{кин}} = p^2/(2m)$	$-\hbar^2/(2m)\nabla^2$
Потенциальная энергия	$W_{\text{пот}}$	$W_{\text{пот}}$
Момент импульса	$\mathbf{L} = [\mathbf{r}\mathbf{p}]$	$-j[\mathbf{r}\nabla]$

том (см. подразд. 1.2) вещественными обязаны быть все собственные значения их операторов.

Оператор \hat{A} является эрмитовым, если для любых двух функций f и g имеет место равенство

$$\int f^* \hat{A} g d\mathbf{r} = \int g (\hat{A} f)^* d\mathbf{r}. \quad (1.11)$$

Подставим в выражение (1.11) $f = g = u_n$, где u_n — собственная функция оператора \hat{A} . В результате из (1.11) получим $A_n = A_n^*$, что означает вещественность собственного значения A_n . Легко доказать и обратное утверждение: из вещественности всех собственных значений следует эрмитовость оператора. Поэтому все операторы наблюдаемых величин являются эрмитовыми.

Эрмитовые операторы обладают двумя очень важными свойствами.

Первое свойство: собственные функции эрмитовых операторов ортогональны, т. е.

$$(u_m, u_n) = \int u_m^* u_n d\mathbf{r} = 0, \quad m \neq n.$$

Поскольку собственные функции определяются с точностью до константы, их всегда можно нормировать так, чтобы

$$(u_m, u_n) = \begin{cases} \delta_{mn} & \text{— дискретный спектр;} \\ \delta(m-n) & \text{— непрерывный спектр.} \end{cases}$$

Здесь δ_{mn} — символ Кронекера, $\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n; \\ 1, & m = n \end{cases}$; $\delta(x)$ — функция Дирака.

Таким образом, для каждой наблюдаемой величины имеем ортонормированную систему собственных функций.

Второе свойство: система собственных функций эрмитова оператора является полной.

На перечисленных свойствах собственных функций операторов квантовой механики построен весь математический аппарат, используемый для исследования взаимодействия электромагнитных волн с веществом.

Условие совместной точной измеримости двух величин. При обсуждении третьего постулата мы установили, что величина A точно измерима, если при каждом измерении результат получается одним и тем же, например A_n , т.е.

$$\langle A \rangle = A_n.$$

Из четвертого постулата ясно, что это возможно в том случае, когда физическая система находится в собственном состоянии оператора \hat{A} . Действительно, при этом

$$\langle A \rangle = \int u_n^* \hat{A} u_n d\mathbf{r} = A_n \int u_n^* u_n d\mathbf{r} = A_n.$$

Можно ли одновременно точно измерить величины A и B ? Да, если волновая функция системы одновременно является собственной функцией и оператора \hat{A} , и оператора \hat{B} . В этом случае \hat{A} и \hat{B} коммутируют, т.е.

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}.$$

Докажем данное утверждение.

Пусть функция $\psi = u_n$ является собственной функцией и оператора \hat{A} , и оператора \hat{B} :

$$\hat{A}u_n = A_n u_n; \quad \hat{B}u_n = A_n u_n.$$

Подействуем операторами $\hat{A}\hat{B}$ и $\hat{B}\hat{A}$ на функцию u_n :

$$\hat{A}\hat{B}u_n = A_n B_n u_n; \quad \hat{B}\hat{A}u_n = A_n B_n u_n.$$

Совпадение результатов свидетельствует о коммутируемости операторов.

Строго говоря, для операторов перестановка не допускается и коммутатор

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \neq 0.$$

В этом случае величины A и B одновременно точно измерить нельзя. Оказывается, что если система находится в состоянии ψ , то среднеквадратические погрешности совместных измерений подчиняются соотношению [4]

$$\Delta A \Delta B \geq 0,5 \left| \int \psi^* [\hat{A}, \hat{B}] \psi d\mathbf{r} \right|. \quad (1.12)$$

Соотношение (1.12) — это математическая формулировка принципа неопределенности Гейзенберга¹. Например, для координаты и импульса из соотношения (1.12) следует, что

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Приведенных сведений достаточно для того, чтобы рассмотреть основные свойства атома.

1.4. Электронные состояния атомов

Стационарное уравнение Шредингера. Если атом ни с чем не взаимодействует, его энергия в явном виде от времени не зависит, т.е. гамильтониан атома \hat{H} не является функцией времени. Тогда можно решить уравнение Шредингера, используя метод разделения переменных.

Представим волновую функцию в виде

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})\varphi(t)$$

и подставим в уравнение (1.7). После преобразований получим

$$j\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{1}{\psi} \hat{H} \psi.$$

Это равенство возможно лишь в том случае, если и правая, и левая части равны некоторой константе разделения W . Тогда, решив уравнение для φ , получим $\varphi(t) = \exp(-jWt/\hbar)$.

Координатная часть волновой функции подчиняется стационарному уравнению Шредингера:

$$\hat{H}\psi = W\psi, \quad (1.13)$$

решениями которого являются собственные функции ψ_n гамильтониана \hat{H} . Соответствующие им собственные значения W_n имеют смысл энергии атома, находящегося в состояниях

¹ В. Гейзенберг (1901—1976) — немецкий физик-теоретик, один из создателей квантовой механики. В 1932 г. получил Нобелевскую премию. Был награжден медалью Макса Планка Германского физического общества (1933 г.), бронзовой медалью Национальной академии наук США (1964 г.), международной золотой медалью Нильса Бора Датского общества инженеров-строителей, электриков и механиков (1970 г.).

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r})\exp(-jW_n t/\hbar). \quad (1.14)$$

Эти состояния называют *стационарными*, поскольку энергия атома, находящегося в них, не меняется во времени и точно измерима. Любое другое состояние атома в силу ортогональности функций (1.14) может быть представлено в виде суперпозиции стационарных состояний:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}) \exp(-jW_n t/\hbar),$$

где c_n — коэффициент ряда.

Поэтому первоочередной задачей при изучении любой консервативной физической системы, в том числе и изолированного атома, является нахождение координатных частей волновых функций $\psi_n(\mathbf{r})$, описывающих конфигурацию атома в стационарных состояниях, а также его энергию W_n . Для этого необходимо решить задачу на собственные значения.

Стационарные состояния одноэлектронного атома. Прежде всего необходимо установить вид гамильтониана одноэлектронного атома. Полная энергия атома складывается из кинетической энергии электрона и потенциальной энергии кулоновского взаимодействия электрона и ядра:

$$W = W_{\text{пот}} + W_{\text{кин}} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{p^2}{2m_e}, \quad (1.15)$$

где Z — число протонов в ядре; e , p , m_e — соответственно заряд, импульс и масса электрона; r — расстояние от ядра до электрона.

Используя уравнение (1.15), в соответствии с табл. 1.1 запишем гамильтониан

$$\hat{H} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2. \quad (1.16)$$

При этом стационарное уравнение Шредингера (1.13) примет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 \psi + \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + W \right) \psi = 0. \quad (1.17)$$

Решение данного уравнения удобно искать в сферической системе координат. Представив искомую функцию в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = R(r)Y(\varphi, \theta)$$

и проделав стандартную процедуру разделения переменных, уравнение (1.17) можно свести к двум независимым уравнениям для радиальной и угловой частей волновой функции: