

Р.Фейнман, Р.Лейтон, М.Сэндс
ФЕЙНМАНОВСКИЕ ЛЕКЦИИ ПО ФИЗИКЕ

8. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА (I)

Оглавление

От редактора	5
Предисловие	6
Глава 1. Амплитуды вероятности	9
§ 1. Законы композиции амплитуд	9
§ 2. Картина интерференции от двух щелей	16
§ 3. Рассеяние на кристалле	20
§ 4. Тождественные частицы	24
Глава 2. Тождественные частицы	30
§ 1. Бозе-частицы и ферми-частицы	30
§ 2. Состояния с двумя бозе-частицами	34
§ 3. Состояния с n бозе-частицами	38
§ 4. Излучение и поглощение фотонов	41
§ 5. Спектр абсолютно черного тела	43
§ 6. Жидкий гелий	50
§ 7. Принцип запрета	51
Глава 3. Спин единица	57
§ 1. Фильтровка атомов при помощи прибора Штерна — Герлаха	57
§ 2. Опыты с профильтрованными атомами	64
§ 3. Последовательно соединенные фильтры Штерна — Герлаха	66
§ 4. Базисные состояния	68
§ 5. Интерферирующие амплитуды	71
§ 6. Механика квантовой механики	75
§ 7. Преобразование к другому базису	79
§ 8. Другие случаи	81
Глава 4. Спин одна вторая	83
§ 1. Преобразование амплитуд	83
§ 2. Преобразование к повернутой системе координат	86
§ 3. Повороты вокруг оси z	92
§ 4. Повороты на 180° и на 90° вокруг оси y	96
§ 5. Повороты вокруг оси x	100
§ 6. Произвольные повороты	102
Глава 5. Зависимость амплитуд от времени	107
§ 1. Покоящиеся атомы; стационарные состояния	107
§ 2. Равномерное движение	111
§ 3. Потенциальная энергия; сохранение энергии	115
§ 4. Силы; классический предел	122
§ 5. «Прецессия» частицы со спином $1/2$	124
Глава 6. Гамильтонова матрица	129
§ 1. Амплитуды и векторы	129
§ 2. Разложение векторов состояний	132

§ 3. Каковы базисные состояния мира?	135
§ 4. Как состояния меняются во времени	139
§ 5. Гамильтонова матрица	143
§ 6. Молекула аммиака	145
Глава 7. Аммиачный мазер	151
§ 1. Состояния молекулы аммиака	151
§ 2. Молекула в статическом электрическом поле	157
§ 3. Переходы в поле зависящем от времени	163
§ 4. Переходы при резонансе	167
§ 5. Переходы вне резонанса	170
§ 6. Поглощение света	171
Глава 8. Другие системы с двумя состояниями	175
§ 1. Молекулярный ион водорода	175
§ 2. Ядерные силы	183
§ 3. Молекула водорода	187
§ 4. Молекула бензола	191
§ 5. Красители	195
§ 6. Гамильтониан частицы со спином $1/2$ в магнитном поле	196
§ 7. Вращающийся электрон в магнитном поле	199
Глава 9. Еще системы с двумя состояниями	205
§ 1. Спиновые матрицы Паули	205
§ 2. Спиновые матрицы как операторы	213
§ 3. Решение уравнений для двух состояний	217
§ 4. Состояния поляризации фотона	219
§ 5. Нейтральный К-мезон	224
§ 6. Обобщение на системы с N состояниями	238
Глава 10. Сверхтонкое расщепление в водороде	243
§ 1. Базисные состояния для системы двух частиц со спином $1/2$	243
§ 2. Гамильтониан основного состояния водорода	247
§ 3. Уровни энергии	254
§ 4. Зеемановское расщепление	257
§ 5. Состояния в магнитном поле	262
§ 6. Проекционная матрица для спина 1	266

От редактора

«Фейнмановские лекции по физике» подходят к концу. Настоящий, восьмой, и следующий, девятый, выпуски, составляющие третий том американского издания, завершают курс и приводят читателя к идеям и задачам современной квантовой механики.

Квантовая механика считается трудной наукой. И это правда: ее методы и понятия еще очень далеки от наглядности. Чтобы рассказать о ней понятно и увлекательно, надо совмещать талант педагога и большой опыт исследователя. Обычно барьера к изучению квантовой механики служит ее математический аппарат. Чтобы научиться решать квантовомеханические задачи, надо знать дифференциальные уравнения в частных производных, свободно обращаться со специальными функциями и уметь делать многое другое.

Но, в действительности трудность квантовой механики связана не только с математикой. Более того, с нее даже не обязательно начинать. В лекциях Фейнмана изучение квантовой механики начинается с физики, а уравнение Шредингера появляется лишь в конце. При этом оказывается, что о многих задачах — от рассеяния электронов до сверхпроводимости — можно рассказать, не прибегая к исследованию сложных уравнений. Однако это вовсе не означает, что квантовая механика простая наука. В действительности выучить формулы и уравнения, пожалуй, легче, чем следовать физическим рассуждениям и понимать логику явлений природы, которая часто выглядит весьма странной. Поэтому надо потратить много времени и труда, чтобы постичь красоту и величие того, о чем рассказано в этом курсе. Если читатель с успехом преодолеет первый этап долгого пути, то будет полностью вознагражден за свои усилия. К счастью, этот путь не имеет конца. Те, кто захочет пойти дальше, должны, конечно, изучить еще многое другое и, разумеется, довольно сложную (и также очень красивую) математику. Однако и для них то, что они узнали из лекций, будет хорошей школой: полезно с самого начала научиться отделять математический язык науки от ее физического содержания.

Квантовая механика — наука не изолированная. Ее нельзя понять без знания классической физики. Поэтому, читая последние выпуски, полезно время от времени возвращаться к предыдущим. Кстати, то, что в них рассказано, будет теперь выглядеть по-новому.

При подготовке перевода настоящих лекций было обнаружено и исправлено довольно много опечаток и мелких ошибок. Наверное, кое-что и осталось. Многие читатели писали нам об этом, за что мы им весьма признательны. В предстоящем новом издании первых четырех выпусков все правильные замечания учтены. Мы просим читателей сообщать нам обо всем, что еще будет ими замечено. Мы пользуемся случаем поблагодарить одного из соавторов книги проф. Мэтью Сэндса за исправления, присланные им специально для русского издания.

Я. Смородинский

Июль 1966 г.

ПРЕДИСЛОВИЕ ►

Со времени величайшего триумфа физики XX века — рождения квантовой механики — прошло уже 40 лет, но до сих пор, читая студентам вводный (а для многих из них и последний) курс физики, мы ограничиваемся, как правило, не более чем случайными намеками на эту центральную область наших знаний о физическом мире. Считая, что так поступать со студентами нехорошо, мы сделали в настоящем курсе попытку изложить им основные, самые существенные идеи квантовой механики и сделать это так, чтобы это им было понятно. Курс был построен совершенно по-новому, особенно если учесть, что он был рассчитан на второкурсников, и все происшедшее можно было в значительной степени рассматривать как эксперимент. Впрочем, после того как выяснилось, насколько легко многие студенты усваивают предмет, я считаю, что эксперимент удался. Конечно, здесь есть что улучшать, и улучшения последуют, как только у нас появится опыт преподавания. Пока же перед вами лишь отчет о первом эксперименте.

В двухгодичном курсе «Фейнмановских лекций по физике», который читался с сентября 1961 г. по май 1963 г. в качестве вводного курса физики в КАЛТЕХе, понятия квантовой механики вводились всюду, где они были необходимы для понимания описываемых явлений. Кроме того, последние двенадцать лекций второго года были целиком посвящены более связному введению в некоторые понятия квантовой механики. Но по мере того, как лекции близились к концу, становилось ясно, что на квантовую механику мы остались слишком мало времени. По мере подготовки материала постепенно выяснялось, что с помощью уже развитых элементарных подходов можно рассмотреть и другие важные и интересные темы. Кроме того, еще было опасение, что, пересчур мало поработав с волновой функцией Шредингера, введенной в двенадцатой лекции, студент не сможет ориентироваться в изложении, принятом в других книгах, которые ему придется читать. Поэтому было решено расширить курс еще на семь лекций; они и были прочитаны второкурсникам в мае 1964 г. Эти лекции завершают и несколько расширяют материал, развитый в предыдущих лекциях.

С самого начала в этом томе делается попытка пролить свет на основные и самые общие черты квантовой механики. Первые главы обращаются к представлениям об амплитуде вероятности, интерференции амплитуд, абстрактному определению состояния и к наложению и разложению состояний, причем с самого начала используются обозначения Дирака. В каждом случае введение нового представления сопровождается подробным разбором некоторых частных примеров, чтобы эти физические идеи приобрели как можно большую реальность. Затем следует зависимость состояний от времени, включая состояния с определенной энергией, и эти идеи немедленно применяются к изучению двухуровневых систем — систем, имеющих только два возможных значения энергии. Подробное изучение аммиачного мазера подготавливает почву для введения поглощения света и индуцированных переходов. Затем лекции продолжают рассмотрение более сложных систем, подводя к изучению распространения электронов в кристалле и к довольно полному изложению квантовомеханической теории момента количества движения. Наше введение в квантовую механику заканчивается обсуждением свойств шредингеровской волновой функции, ее дифференциального уравнения и решений для атома водорода.

Последнюю главу этого тома не следует считать частью «курса». Это «семинар» по сверхпроводимости, проведенный в духе тех лекций из первых двух томов, которые были прочитаны «для развлечения», чтобы помочь студентам шире взглянуть на связь того, чему их учили, с общей физической культурой. «Эпилог» Фейнмана ставит точку на этом курсе.

Как уже объяснялось в предисловии к первому тому (см. вып. 1—4), эти лекции являются лишь частью программы по разработке нового вступительного курса, проводимой в КАЛТЕХе под руководством Комитета по пересмотру курса физики (Роберт Лейтон, Виктор Неер и Мэтью Сэндс). Осуществление этой программы стало возможным благодаря помощи Фонда Форда. Техническую помощь при подготовке этого тома оказали Мэрилу Клейтон, Юлия Курцио, Джеймс Хартл, Том Харвей, Мартин Израэль, Патриция Прейс, Фанни Уоррен, Барбара Циммерман и многие другие. Проф. Джерри Нойгебауэр и проф. Чарльз Уилтс внимательно прочли рукопись и во многом способствовали четкости и ясности изложения материала.

Но сама повесть о квантовой механике, которую вы здесь найдете, принадлежит Ричарду Фейнману. Наши труды не были напрасными, если нам удалось донести до других хоть долю восторга, который мы испытывали сами, следя, как в его полных жизни лекциях по физике перед нами разворачиваются все новые и новые идеи.

Мэтью Сэндс

Декабрь 1964

Гла́ва 1

АМПЛИТУДЫ ВЕРОЯТНОСТИ*

§ 1. Законы композиции амплитуд

§ 2. Картина интерференции от двух центров

§ 3. Рассеяние на вещественных частичках

§ 4. Стабилизация частичек

Гармонизацию гл. 37 (вып. 3) «Квантовое поведение» гл. 38 (вып. 3) «Синтезирование между волновой и кориолисовой формами вращения»

Когда Шредингер впервые открыл правильные законы квантовой механики, он написал уравнение, которое описывало амплитуду вероятности обнаружения частицы в различных местах. Это уравнение было очень похоже на уравнения, которые были уже известны классическим физикам, они ими пользовались, чтобы описать движение воздуха в звуковой волне, распространение света и т. д. Так что в начале развития квантовой механики большую часть времени люди занимались решением этого уравнения. Но в то же время началось (в частности, благодаря Борну и Дираку) понимание тех фундаментально новых идей, которые лежали в основе квантовой механики. По мере дальнейшего ее развития выяснилось, что в ней есть много такого, что прямо в уравнении Шредингера не содержится, — таких вещей, как спин электрона и различные релятивистские явления. Все курсы квантовой механики по традиции начинают с того же самого, повторяя путь, пройденный в историческом развитии предмета. Сперва долго изучают классическую механику, чтобы потом

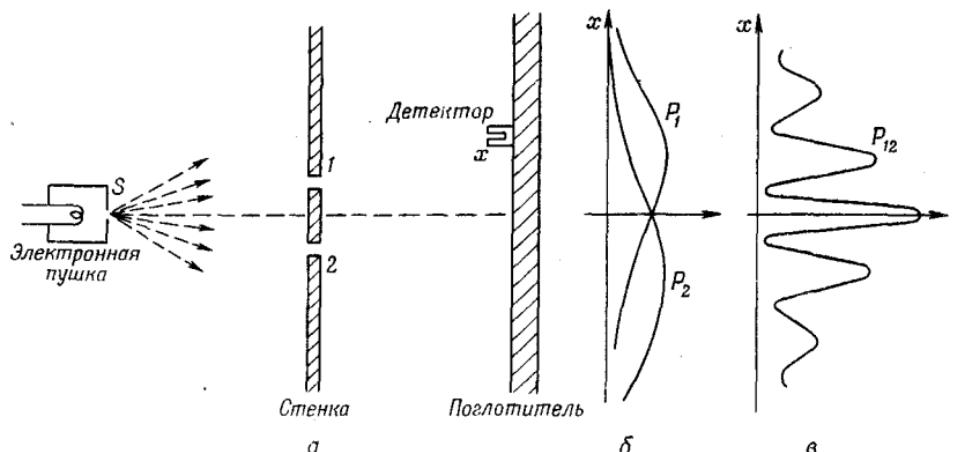
* В американском издании этот том начинается с двух глав из второго тома [гл. 37 и 38 (вып. 3)], которые авторы считали нужным повторить. Это было сделано для того, чтобы третий том можно было читать, не обращаясь к прежним томам. В русском издании мы не стали печатать их снова: читатель должен всегда держать первые выпуски под рукой, поэтому нумерация глав в русском издании сдвинута на 2 единицы по сравнению с третьим томом. Из тех же соображений мы не перепечатали вновь гл. 34 и 35, они вошли в вып. 7. — Прим. ред.

понять, как решается уравнение Шредингера. Затем столь же долго получают различные решения. И лишь после детального изучения этого уравнения переходят к «высшим» вопросам, таким, как спин электрона.

Сначала мы тоже считали, что лучше всего закончить эти лекции, показав, как решаются уравнения классической физики в различных сложных случаях, таких, как описание звуковых волн в замкнутом пространстве, типы электромагнитного излучения в цилиндрических полостях и т. д. Таков был первоначальный план этого курса. Но затем мы решили отказаться от этого плана и вместо этого дать введение в квантовую механику. Мы пришли к заключению, что то, что обычно именуют «высшими» разделами квантовой механики, на самом деле совсем простая вещь. Нужная для этого математика чрезвычайно проста — требуются лишь несложные алгебраические операции, никаких дифференциальных уравнений не нужно (или в крайнем случае нужны самые простые). Проблема только в том, чтобы перепрыгнуть через одно препятствие: усвоить, что мы больше не имеем права детально описывать поведение частиц в пространстве. И вот этим-то мы и собираемся заняться: рассказать вам о том, что обычно называют «высшими» разделами квантовой механики. Но уверяю вас, это самые что ни на есть простые (в полном смысле этого слова), но в то же время самые фундаментальные ее части. Честно говоря, это педагогический эксперимент, и, насколько нам известно, он никогда раньше не ставился.

Конечно, здесь есть своя трудность: квантовомеханическое поведение вещей чрезвычайно странно. Никто не может полагаться на то, что его ежедневный опыт даст ему интуитивное, грубое представление о том, что должно произойти. Так что этот предмет можно представить двояким образом: можно либо довольно грубо описать, что происходит — сообщать более или менее подробно, что случится, но не формулировать точных законов, либо же можно приводить и точные законы в их абстрактном виде. Но тогда эта абстракция приведет к тому, что вы не будете знать, к чему физически она относится. Этот способ не годится, потому что он совершенно отвлеченный, а от первого способа будет оставаться неприятный осадок, потому что никогда не будет точно известно, что верно, а что нет. И мы не знаем, как эту трудность обойти. С этой проблемой мы уже сталкивались раньше [гл. 37 и 38 (вып. 3)]. В гл. 37 изложение относительно строгое, а в гл. 38 дано лишь грубое описание различных явлений. Теперь мы попытаемся найти золотую середину.

Мы начнем эту главу с некоторых общих квантовомеханических представлений. Кое-какие из этих утверждений будут совершенно точными, иные же точны лишь частично. При изложе-



Фиг. 1.1. Интерференционный опыт с электронами.

ни нам будет трудно отмечать, которые из них какие, но к тому времени, когда вы дочитаете книжку до конца, вы уже сами будете понимать, оглядываясь назад, какие части устояли, а какие оказались только грубым объяснением. Главы, которые последуют за этой, не будут столь неточными. Одна из причин, почему мы пытаемся в последующих главах быть как можно более точными, состоит в том, что таким образом мы сможем продемонстрировать одно из самых прекрасных свойств квантовой механики — как много в ней удается вывести из столь малого.

Мы опять начинаем с выяснения свойств суперпозиции, наложения, амплитуд вероятностей. Для примера мы сошлемся на опыт, описанный в гл. 37 (вып. 3) и еще раз показанный здесь на фиг. 1.1. Имеется источник частиц s , скажем электронов; дальше стоит стенка, в которой имеются две щели; за стенкой помещен детектор; он находится где-то в точке x . Мы спрашиваем: какова вероятность того, что в точке x будет обнаружена частица? Наш *первый общий принцип квантовой механики* заключается в том, что *вероятность* того, что частица достигнет точки x , выйдя из источника s , может быть численно представлена квадратом модуля комплексного числа, называемого *амплитудой вероятности*, в нашем случае — «*амплитудой* того, что частица из s попадет в x »*. К этим амплитудам мы будем прибегать так часто, что удобно будет использовать сокращенное обозначение, изобретенное Дираком и повсеместно применяемое в квантовой механике, чтобы отображать это понятие. Мы запи-

* По-русски, наверно, правильнее говорить *амплитуда вероятности*, но короче говорить просто *амплитуда* и примириться с выражением типа «*амплитуда* того, что электрон находится в точке x ». — Прим. ред.

шем амплитуду вероятности так:

$$\langle \text{Частица попадает в } x | \text{Частица покидает } s \rangle. \quad (1.1)$$

Иными словами, две скобки $\langle \rangle$ — это знак, эквивалентный словам «амплитуда (вероятности) того, что»; выражение *справа* от вертикальной черточки всегда задает *начальное* условие, а то, что *слева*, — *конечное* условие. А иногда будет удобно еще сильнее сокращать, описывая начальные и конечные условия одной буквой. Например, амплитуду (1.1) можно при случае записать и так:

$$\langle x | s \rangle. \quad (1.2)$$

Надо подчеркнуть, что подобная амплитуда — это, конечно, всего-навсего число — *комплексное* число.

В гл. 37 (вып. 3) мы уже видели, что, когда частица может достичь детектора двумя путями, итоговая вероятность не есть сумма двух вероятностей, а должна быть записана в виде квадрата модуля суммы двух амплитуд. Мы обнаружили, что вероятность того, что электрон достигнет детектора при обеих открытых амбразурах, есть

$$P_{12} = |\varphi_1 + \varphi_2|^2. \quad (1.3)$$

Теперь мы этот результат собираемся записать в наших новых обозначениях. Сначала сформулируем наш *второй общий принцип* квантовой механики. Когда частица может достичь данного состояния двумя возможными путями, полная амплитуда процесса есть *сумма амплитуд* для этих двух путей, рассматриваемых порознь. В наших новых обозначениях мы напишем

$$\langle x | s \rangle \text{ обе щели открыты} = \langle x | s \rangle \text{ через 1} + \langle x | s \rangle \text{ через 2}. \quad (1.4)$$

При этом мы предполагаем, что щели 1 и 2 достаточно малы, так что, когда мы говорим, что электрон прошел сквозь щель, не встает вопрос, через какую часть щели он прошел. Конечно, можно разбить каждую щель на участки с конечной амплитудой того, что электрон прошел через верх щели или через низ и т. д. Мы допустим, что щель достаточно мала, так что нам не надо думать об этой детали. Это одна из тех неточностей, о которых мы говорили; суть дела можно уточнить, но мы покамест не будем этого делать.

Теперь мы хотим подробнее расписать, что можно сказать об амплитуде процесса, в котором электрон достигает детектора в точке x через щель 1. Это можно сделать, применив *третий общий принцип*. Когда частица идет каким-то определенным данным путем, то амплитуда для этого пути может быть записана в виде произведения амплитуды того, что будет пройдена часть пути, на амплитуду того, что и остаток пути будет пройден.

Для установки, показанной на фиг. 1.1, амплитуда перехода от s к x сквозь щель 1 равна амплитуде перехода от s к 1, умноженной на амплитуду перехода от 1 к x :

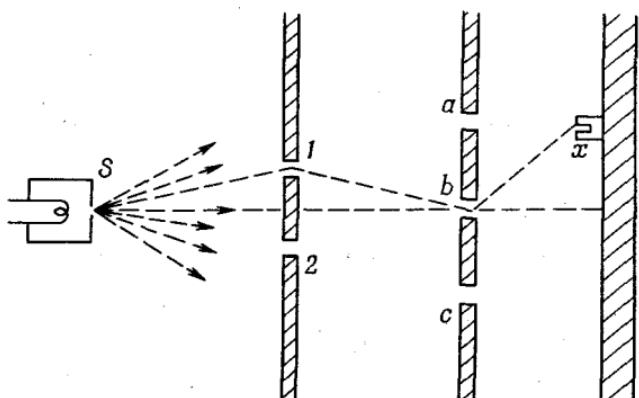
$$\langle x | s \rangle_{\text{через } 1} = \langle x | 1 \rangle \langle 1 | s \rangle. \quad (1.5)$$

Опять-таки, это утверждение не совсем точно. Нужно добавить еще один множитель — амплитуду того, что электрон пройдет щель в точке 1; но пока это у нас просто щель, и мы положим упомянутый множитель равным единице.

Заметьте, что уравнение (1.5) кажется написанным задом наперед. Его надо читать справа налево: электрон переходит от s к 1 и затем от 1 к x . В итоге если события происходят друг за другом, т. е. если вы способны проанализировать один из путей частицы, говоря, что она сперва делает то-то, затем то-то, потом то-то, то итоговая амплитуда для этого пути вычисляется последовательным умножением на амплитуду каждого последующего события. Пользуясь этим законом, мы можем уравнение (1.4) переписать так:

$$\langle x | s \rangle_{\text{обе щели открыты}} = \langle x | 1 \rangle \langle 1 | s \rangle + \langle x | 2 \rangle \langle 2 | s \rangle.$$

А теперь мы покажем, что, используя одни только эти принципы, уже можно решать и более трудные задачи, наподобие показанной на фиг. 1.2. Тут изображены две стенки: одна с двумя щелями 1 и 2, другая с тремя — a , b и c . За второй стенкой в точке x стоит детектор, и мы хотим узнать амплитуду того, что частица достигнет x . Один способ решения состоит в расчете суперпозиции, или интерференции, волн, проходящих сквозь щели; но можно сделать и иначе, сказав, что имеется шесть возможных путей, и накладывая друг на друга их амплитуды. Электрон может пройти через щель 1, затем через щель a и потом в x , или же он мог бы пройти сквозь щель 1, затем сквозь



Фиг. 1.2. Интерференционный опыт посложнее.

щель b и затем в x и т. д. Согласно нашему второму принципу, амплитуды взаимоисключающих путей складываются, так что мы должны записать амплитуду перехода от s к x в виде суммы шести отдельных амплитуд. С другой стороны, согласно третьему принципу, каждую из них можно записать в виде произведения трех амплитуд. Например, одна из них — это амплитуда перехода от s к 1 , умноженная на амплитуду перехода от 1 к a и на амплитуду перехода от a к x . Используя наше сокращенное обозначение, полную амплитуду перехода от s к x можно записать в виде

$$\langle x | s \rangle = \langle x | a \rangle \langle a | 1 \rangle \langle 1 | s \rangle + \langle x | b \rangle \langle b | 1 \rangle \langle 1 | s \rangle + \dots \\ \dots + \langle x | c \rangle \langle c | 2 \rangle \langle 2 | s \rangle.$$

Можно сэкономить место, использовав знак суммы:

$$\langle x | s \rangle = \sum_{\substack{i=1, 2 \\ \alpha=a, b, c}} \langle x | \alpha \rangle \langle \alpha | i \rangle \langle i | s \rangle. \quad (1.6)$$

Чтобы, пользуясь этим методом, проводить какие-то вычисления, надо, естественно, знать амплитуду перехода из одного места в другое. Я приведу пример типичной амплитуды. В ней не учтены некоторые детали, такие, как поляризация света или спин электрона, а в остальном она абсолютно точна. С ее помощью вы сможете решать задачи, куда входят различные сочетания щелей. Предположим, что частица с определенной энергией переходит в пустом пространстве из положения r_1 в положение r_2 . Иными словами, это свободная частица: на нее не действуют никакие силы. Отбрасывая численный множитель впереди, амплитуду перехода от r_1 к r_2 можно записать так:

$$\langle r_2 | r_1 \rangle = \frac{e^{ip \cdot r_{12}/\hbar}}{r_{12}}, \quad (1.7)$$

где $r_{12} = r_2 - r_1$, а p — импульс частицы, связанный с ее энергией E релятивистским уравнением

$$p^2 c^2 = E^2 - (m_0 c^2)^2$$

или нерелятивистским уравнением

$$\frac{p^2}{2m} = \text{Кинетическая энергия.}$$

Уравнение (1.7) в итоге утверждает, что у частицы есть волновые свойства, что амплитуда распространяется как волна с волновым числом, равным импульсу, деленному на \hbar .

В общем случае в амплитуду и в соответствующую вероятность входит также и время. В большинстве наших первоначальных рассуждений будет предполагаться, что источник испускает частицы с данной энергией беспрерывно, так что о

времени не нужно будет думать. Но, вообще-то говоря, мы вправе заинтересоваться и другими вопросами. Допустим, что частица испущена в некотором месте P в некоторый момент и вы хотите знать амплитуду того, что она окажется в каком-то месте, скажем r , в более позднее время. Это символически можно представить в виде амплитуды $\langle r, t = t_1 | P, t = 0 \rangle$. И ясно, что она зависит и от r , и от t . Помещая детектор в разные места и делая измерения в разные моменты времени, вы получите разные результаты. Эта функция r и t , вообще говоря, удовлетворяет дифференциальному уравнению, которое является волновым уравнением. Скажем, в нерелятивистском случае это уравнение Шредингера. Получается волновое уравнение, аналогичное уравнению для электромагнитных волн или звуковых волн в газе. Однако надо подчеркнуть, что волновая функция, удовлетворяющая уравнению, не похожа на реальную волну в пространстве; с этой волной нельзя связать никакой реальности, как это делается со звуковой волной.

Хотя, имея дело с одной частицей, можно начать пытаться мыслить на языке «корпускулярных волн», но ничего в этом хорошего нет, потому что если, скажем, частиц не одна, а две, то амплитуда обнаружить одну из них в r_1 , а другую в r_2 не есть обычная волна в трехмерном пространстве, а зависит от *шести* пространственных переменных r_1 и r_2 . Когда частиц две (или больше), возникает потребность в следующем добавочном принципе. Если две частицы не взаимодействуют, то амплитуда того, что одна частица совершил что-то одно, а другая сделает что-то другое, есть произведение двух амплитуд — амплитуд того, что две частицы проделали бы это по отдельности. Например, если $\langle a | s_1 \rangle$ есть амплитуда того, что частица 1 перейдет из s_1 в a , а $\langle b | s_2 \rangle$ — амплитуда того, что частица 2 перейдет из s_2 в b , то амплитуда того, что оба эти события произойдут вместе, есть

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

И еще одну вещь надо подчеркнуть. Предположим, нам неизвестно, откуда появляются частицы на фиг. 1.2, прежде чем они пройдут через щели 1 и 2 в первой стенке. Несмотря на это, мы все равно можем предсказать, что произойдет за стенкой (скажем, вычислить амплитуду попасть в x), если только нам даны два числа: амплитуда попадания в 1 и амплитуда попадания в 2. Иными словами, из-за того, что амплитуды последовательных событий перемножаются, как это показано в уравнении (1.6), все, что вам нужно знать для продолжения анализа,— это два числа, в данном частном случае $\langle 1 | s \rangle$ и $\langle 2 | s \rangle$. Этих двух комплексных чисел достаточно для того, чтобы предсказать все будущее. Это-то и делает квантовую механику простой. В следующих главах выяснится, что именно это мы и делаем,

когда отмечаем начальные условия при помощи двух (или нескольких) чисел. Конечно, эти числа зависят от того, где расположен источник и каковы другие свойства прибора, но, как только эти числа даны, все подобные детали нам больше не нужны.

§ 2. Картина интерференции от двух щелей

Рассмотрим еще раз вопрос, который мы довольно подробно обсудили раньше, в гл. 37 (вып. 3). Сейчас мы используем идею об амплитуде во всей ее мощи, чтобы показать вам, как она работает. Вернемся к старому опыту, изображенному на фиг. 1.1, добавив к нему еще источник света и поместив его за щелями (ср. фиг. 37.4 гл. 37). В гл. 37 мы обнаружили следующий примечательный результат. Если мы заглядывали за щель 1 и замечали фотоны, рассеивавшиеся где-то за ней, то распределение вероятности того, что электрон попадал в x при одновременном наблюдении этих фотонов, было в точности такое же, как если бы щель 2 была закрыта. Суммарное распределение для электронов, которые были «замечены» либо у щели 1, либо у щели 2, было суммой отдельных распределений и было совсем не похоже на распределение, которое получалось, когда свет бывал выключен. По крайней мере так бывало, когда использовался свет с малой длиной волн. Когда длина волны начинала расти и у нас исчезала уверенность в том, у какой из щелей произошло рассеяние света, распределение становилось похожим на то, которое бывало при выключенном свете.

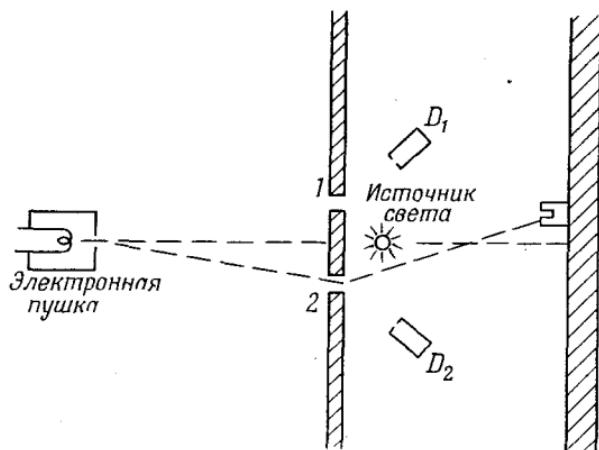
Посмотрим теперь, что здесь происходит, используя наши новые обозначения и принципы композиции амплитуд. Чтобы упростить запись, можно через φ_1 опять обозначить амплитуду того, что электрон придет в x через щель 1, т. е.

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

Сходным же образом φ_2 будет обозначать амплитуду того, что электрон достигнет детектора через щель 2:

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

Это — амплитуды проникновения электрона через щель и появления в x , когда света нет. А если свет включен, мы поставим себе вопрос: какова амплитуда процесса, в котором вначале электрон выходит из s , а фотон испускается источником света L , а в конце электрон оказывается в x , а фотон обнаруживается у щели 1? Предположим, что мы с помощью счетчика D_1 наблюдаем фотон у щели 1 (фиг. 1.3), а такой же счетчик D_2 считает фотоны, рассеянные у щели 2. Тогда можно говорить об амплитуде появления фотона в счетчике D_1 , а электрона в x и об



Ф и г. 1.3. Опыт, в котором определяется, через которую из щелей проник электрон.

амплитуде появления фотона в счетчике D_2 , а электрона в x . Попробуем их подсчитать.

Хоть мы и не располагаем правильной математической формулой для всех множителей, входящих в этот расчет, но дух расчета вы почувствуете из следующих рассуждений. Во-первых, имеется амплитуда $\langle 1 | s \rangle$ того, что электрон доходит от источника к щели 1. Затем можно предположить, что имеется конечная амплитуда того, что, когда электрон находится у щели 1, он рассеивает фотон в счетчик D_1 . Обозначим эту амплитуду через a . Затем имеется амплитуда $\langle x | 1 \rangle$ того, что электрон переходит от щели 1 к электронному счетчику в x . Амплитуда того, что электрон перейдет от s к x через щель 1 и рассеет фотон в счетчик D_1 , тогда равна

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

Или в наших прежних обозначениях это просто $a\varphi_1$.

Имеется также некоторая амплитуда того, что электрон, проходя сквозь щель 2, рассеет фотон в счетчик D_1 . Вы скажете: «Это невозможно; как он может рассеяться в счетчик D_1 , если тот смотрит прямо в щель 1?» Если длина волны достаточно велика, появляются дифракционные эффекты, и это становится возможным. Конечно, если прибор будет собран хорошо и если используются лишь фотоны с короткой длиной волны, то амплитуда того, что фотон рассеется в счетчик D_1 от электрона в щели 2, станет очень маленькой. Но для общности рассуждения мы учтем тот факт, что такая амплитуда всегда имеется, и обозначим ее через b . Тогда амплитуда того, что электрон проходит через щель 2 и рассеивает фотон в счетчик D_1 , есть

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

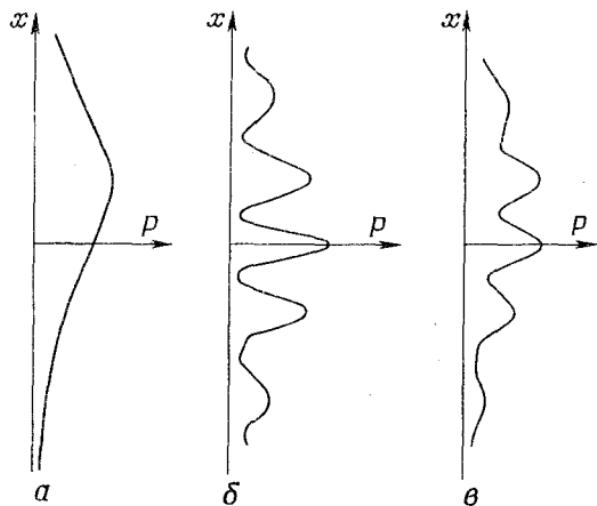
Амплитуда обнаружения электрона в x и фотона в счетчике D_1 есть сумма двух слагаемых, по одному для каждого мыслимого пути электрона. Каждое из них в свою очередь составлено из двух множителей: первого, выражающего, что электрон прошел сквозь щель, и второго — что фотон рассеян таким электроном в счетчик D_1 ; мы имеем

$$\langle \begin{array}{l} \text{Электрон в } x \\ \text{Фотон в счетчике } D_1 \end{array} \mid \begin{array}{l} \text{Электрон из } s \\ \text{Фотон из } L \end{array} \rangle = a\varphi_1 + b\varphi_2. \quad (1.8)$$

Аналогичное выражение можно получить и для случая, когда фотон будет обнаружен другим счетчиком D_2 . Если допустить для простоты, что система симметрична, то a будет также амплитудой попадания фотона в счетчик D_2 , когда электрон проскаивает через щель 2, а b — амплитудой попадания фотона в счетчик D_2 , когда электрон проходит через щель 1. Соответствующая полная амплитуда — амплитуда того, что фотон окажется в счетчике D_2 , а электрон в x , — равна

$$\langle \begin{array}{l} \text{Электрон в } x \\ \text{Фотон в счетчике } D_2 \end{array} \mid \begin{array}{l} \text{Электрон из } s \\ \text{Фотон из } L \end{array} \rangle = a\varphi_2 + b\varphi_1. \quad (1.9)$$

Вот и все. Теперь мы легко можем рассчитать вероятность тех или иных случаев. Скажем, мы желаем знать, с какой вероятностью будут получаться отсчеты в счетчике D_1 при попадании электрона в x . Это будет квадрат модуля амплитуды, даваемой формулой (1.8), т. е. попросту $|a\varphi_1 + b\varphi_2|^2$. Поглядим на это выражение внимательнее. Прежде всего, если $b = 0$



Фиг. 1.4. Вероятность отсчета электрона в x при условии, что в D_1 замечен фотон в опыте, показанном на фиг. 1.3.

a — при $b=0$; б — при $b=a$; в — при $0 < b < a$.

(мы хотели бы, чтобы наш прибор работал именно так), ответ просто равен $|\Phi_1|^2$ с множителем $|a|^2$. Это как раз то распределение вероятностей, которое получилось бы при наличии лишь одной щели, как показано на фиг. 1.4, а. С другой стороны, если длина волны велика, рассеяние за щелью 2 в счетчик D_1 может стать почти таким же, как за щелью 1. Хотя в a и b могут входить какие-то фазы, возьмем самый простой случай, когда обе фазы одинаковы. Если a практически совпадает с b , то полная вероятность обращается в $|\Phi_1 + \Phi_2|^2$, умноженное на $|a|^2$, потому что общий множитель a можно вынести. Но тогда выходит то самое распределение вероятностей, которое получилось бы, если бы фотонов вовсе не было. Следовательно, когда длина волны очень велика (и детектировать фотоны бесполезно), вы возвращаетесь к первоначальной кривой распределения, на которой видны интерференционные эффекты, как показано на фиг. 1.4, б. Когда же детектирование частично все же оказывается эффективным, возникает интерференция между большим количеством Φ_1 и малым количеством Φ_2 и вы получаете промежуточное распределение, такое, какое намечено на фиг. 1.4, в. Само собой разумеется, если нас заинтересуют одновременные отсчеты фотонов в счетчике D_2 и электронов в x , то мы получим тот же результат. Если вы вспомните рассуждения гл. 37 (вып. 3), то увидите, что эти результаты описывают количественно то, что было сказано там.

Нам хотелось бы подчеркнуть очень важное обстоятельство и предостеречь от часто допускаемой ошибки. Пусть вас интересует только амплитуда того, что электрон попадает в x , причем вам *безразлично*, в какой счетчик попал фотон — в D_1 или в D_2 . Должны ли вы складывать амплитуды (1.8) и (1.9)? Нет! *Никогда не складывайте амплитуды разных, отличных друг от друга конечных состояний*. Как только фотон был воспринят одним из фотонных счетчиков, мы всегда, если надо, можем узнать, не возмущая больше системы, какая из альтернатив (взаимоисключающих событий) реализовалась. У каждой альтернативы есть своя вероятность, полностью независимая от другой. Повторяем, не складывайте амплитуд для различных *конечных* условий (под «конечным» мы понимаем тот момент, когда нас интересует *вероятность*, т. е. когда опыт «закончен»). Зато нужно складывать амплитуды для различных *неразличимых* альтернатив в ходе самого опыта, прежде чем целиком закончится процесс. В конце процесса вы можете, если хотите, сказать, что вы «не желаете смотреть на фотон». Это ваше личное дело, но все же амплитуды складывать нельзя. Природа не знает, на что вы смотрите, на что нет, она ведет себя так, как ей положено, и ей безразлично, интересуют ли вас ее данные или нет. Так что мы не должны складывать амплитуды. Мы сперва возводим в квадрат модули амплитуд для всех возмож-

ных разных конечных состояний, а затем уж складываем. Правильный результат для электрона в x и фотона то ли в D_1 , то ли в D_2 таков:

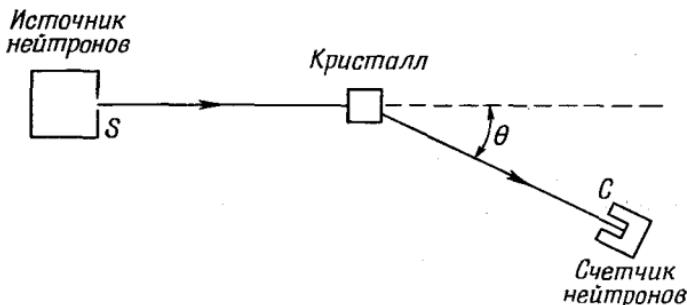
$$\begin{aligned} & \left| \langle \text{Электрон в } x | \text{Электрон из } s \rangle \right|^2 + \\ & + \left| \langle \text{Фотон в } D_1 | \text{Фотон из } L \rangle \right|^2 = \\ & = |a\varphi_1 + b\varphi_2|^2 + |a\varphi_2 + b\varphi_1|^2. \end{aligned} \quad (1.10)$$

§ 3. Рассеяние на кристалле

Следующий пример — это явление, в котором интерференцию амплитуд вероятности следует проанализировать тщательнее. Речь идет о процессе рассеяния нейтронов на кристалле. Пусть имеется кристалл, в котором много атомов, а в центре каждого атома — ядро; ядра расположены периодически, и откуда-то издалека на них налетает пучок нейтронов. Различные ядра в кристалле можно пронумеровать индексом i , где i пробегает целые значения $1, 2, 3, \dots, N$, а N равняется общему числу атомов. Задача состоит в том, чтобы подсчитать вероятность того, что нейtron окажется в счетчике, изображенном на фиг. 1.5. Для каждого отдельного атома i амплитуда того, что нейtron достигнет счетчика C , равна амплитуде того, что нейtron из источника S попадет в ядро i , умноженной на амплитуду a рассеяния в этом месте и умноженной на амплитуду того, что он из i попадет в счетчик C . Давайте запишем это:

$$\langle \text{Нейtron в } C | \text{Нейtron из } S \rangle_{\text{через } i} = \langle C | i \rangle a \langle i | S \rangle. \quad (1.11)$$

Написав это, мы предположили, что амплитуда рассеяния a — одна и та же для всех атомов. Здесь у нас есть множество, по-видимому, неразличимых путей. Они неразличимы оттого, что нейtron с небольшой энергией рассеивается на ядре, не выбивая



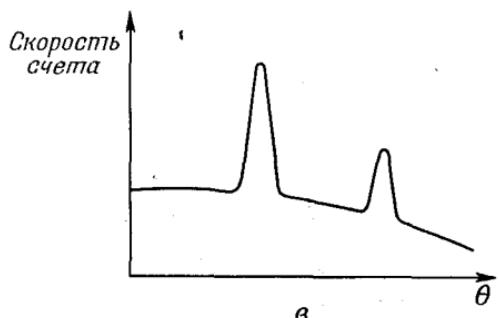
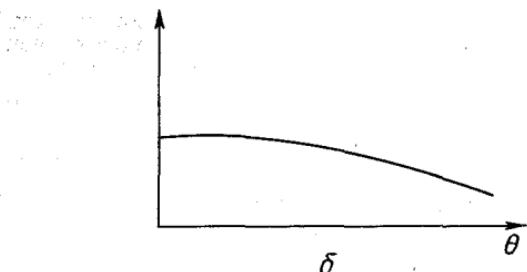
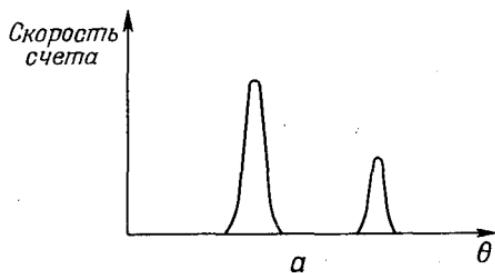
Фиг. 1.5. Измерение рассеяния нейтронов на кристалле.

при этом самого атома с его места в кристалле — никакой «отметки» о рассеянии не остается. Согласно нашим прежним рассуждениям, полная амплитуда того, что нейtron попал в C , включает в себя сумму выражения (1.11) по всем атомам:

$$\langle \text{Нейтрон в } C | \text{ Нейтрон из } S \rangle = \sum_{i=1}^N \langle C | i \rangle a \langle i | S \rangle. \quad (1.12)$$

Из-за того, что складываются амплитуды рассеяния на атомах, по-разному расположенных в пространстве, у амплитуд будут разные фазы, и это даст характерную интерференционную картину, которую мы уже анализировали на примере рассеяния света на решетке.

Интенсивность нейтронов как функция угла в подобном опыте действительно часто обнаруживает самые измене-



Фиг. 1.6. Скорость счета нейтронов как функция угла.

а — для ядер со спином 0; б — вероятность рассеяния с переворотом спина; в — наблюдаемая скорость счета для ядра со спином $1/2$.

ния — очень острые интерференционные пики, между которыми ничего нет (фиг. 1.6, а). Однако в некоторых сортах кристаллов этого не случается, в них наряду с упомянутыми выше дифракционными пиками имеется общий фон от рассеяния во всех направлениях. Мы должны попытаться понять столь таинственную с виду причину этого. Дело в том, что мы не учли одного важного свойства нейтрона. Его спин равен $\frac{1}{2}$, и тем самым он может находиться в двух состояниях: либо его спин направлен вверх (скажем, поперек страницы на фиг. 1.5), либо вниз. И если у ядер самого кристалла спина нет, то спин нейтрона никакого действия не окажет. Но когда и у ядер кристалла есть спин, равный, скажем, тоже $\frac{1}{2}$, то вы заметите фон от описанного выше размазанного рассеяния. Объяснение состоит в следующем.

Если спин нейтрона куда-то направлен и спин атомного ядра направлен туда же, то в процессе рассеяния направление спина не меняется. Если же спины нейтрона и атомного ядра направлены в противоположные стороны, то рассеяние может происходить посредством двух процессов, в одном из которых направления не меняются, а в другом происходит обмен направлениями. Это правило о том, что сумма спинов не должна меняться, аналогично нашему классическому закону сохранения количества движения. И мы уже в состоянии будем понять интересующее нас явление, если предположим, что все ядра, на которых происходит рассеяние, имеют одно и то же направление спина. Нейtron с тем же направлением спина тогда рассеется так, что получится ожидавшееся узкое интерференционное распределение. А что будет с нейтроном с противоположным направлением спина? Если он рассеивается без переворота направления спина, то ничего по сравнению со сказанным не меняется; но если при рассеянии оба спина переворачиваются, то, вообще говоря, можно указать, на каком из ядер произошло рассеяние, потому что именно у этого ядра спин перевернулся. Но если мы в состоянии указать, на каком атоме случилось рассеяние, то причем здесь остальные атомы? Ни при чем, конечно. Рассеяние здесь такое же, как от отдельного атома.

Чтобы учесть этот эффект, надо видоизменить математическую формулировку уравнения (1.12), потому что в том анализе состояния не были охарактеризованы полностью. Пусть вначале у всех нейтронов, вылетающих из источника, спин направлен вверх, а у всех ядер кристалла — вниз. Во-первых, нам нужна амплитуда того, что в счетчике нейтронов их спин окажется направленным вверх и все спины в кристалле будут по-прежнему смотреть вниз. Это ничем не отличается от наших прежних рассуждений. Обозначим через a амплитуду рассеяния без переворота спина. Амплитуда рассеяния от i -го атома,

разумеется, равна

$$\langle C_{\text{вверх}}, \text{ весь кристалл вниз} | S_{\text{вверх}}, \text{ весь кристалл вниз} \rangle = \\ = \langle C | i \rangle a \langle i | S \rangle.$$

Поскольку все спины атомов направлены вниз, разные альтернативы (разные значения i) нельзя друг от друга отличить. В этом процессе все амплитуды интерферируют.

Но есть и другой случай, когда спин детектируемого нейтрона смотрит вниз, хотя вначале, в S , он смотрел вверх. Тогда в кристалле один из спинов должен перевернуться вверх, скажем спин k -го атома. Допустим, что у всех атомов амплитуда рассеяния с переворотом спина одна и та же и равна b . (В реальном кристалле имеется еще одна неприятная возможность: перевернутый спин переходит к какому-то другому атому, но допустим, что в нашем кристалле вероятность этого мала.) Тогда амплитуда рассеяния равна

$$\langle C_{\text{вниз}}, \text{ ядро } k \text{ вверх} | S_{\text{вверх}}, \text{ весь кристалл вниз} \rangle = \\ = \langle C | k \rangle b \langle k | S \rangle. \quad (1.13)$$

Если мы спросим теперь, какова вероятность того, что у нейтрона спин окажется направленным вниз, а у k -го ядра — вверх, то она будет равняться квадрату модуля этой амплитуды, т. е. просто $|b|^2$, умноженному на $|\langle C | k \rangle \langle k | S \rangle|^2$. Второй множитель почти не зависит от того, где атом k расположен в кристалле, и все фазы при вычислении квадрата модуля исчезают. Вероятность рассеяния на любом ядре кристалла с переворотом спина, стало быть, равна

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

что дает гладкое распределение, как на фиг. 1.6, б.

Вы можете возразить: «А мне все равно, какой атом перевернулся». Пусть так, но природа-то это знает, и вероятность на самом деле выходит такой, как написано выше,— никакой интерференции не остается. А вот если вас заинтересует вероятность того, что спин в детекторе будет направлен вверх, а спины всех атомов — по-прежнему вниз, то вы должны будете взять квадрат модуля суммы:

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

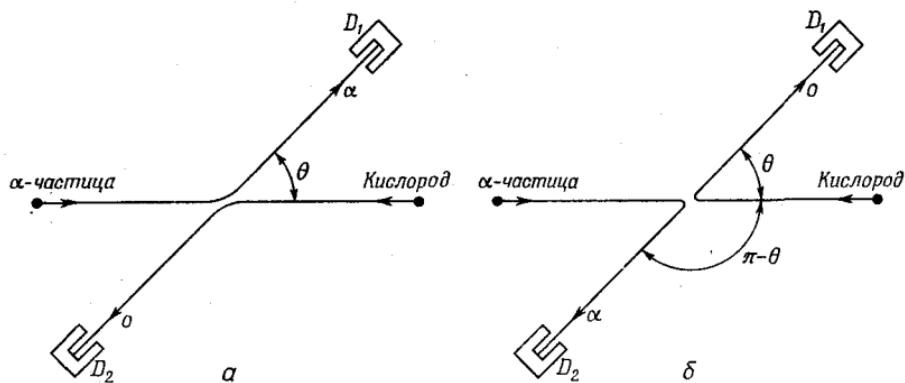
Поскольку у каждого слагаемого в этой сумме есть своя фаза, то они интерферируют и появляется резкая интерференционная картина. И если мы проводим эксперимент, в котором мы не наблюдаем спина детектируемого нейтрона, то могут произойти события обоих типов и сложатся отдельные вероятности. Пол-

ная вероятность (или скорость счета) как функция угла тогда выглядит подобно кривой на фиг. 1.6, в.

Давайте еще раз окинем взглядом физику этого опыта. Если вы способны *в принципе* различить взаимоисключающие *конечные состояния* (хотя вы и не собирались на самом деле этого делать), то полная конечная вероятность получается подсчетом *вероятности каждого состояния* (а не амплитуды) и последующим их сложением. А если вы *неспособны даже в принципе* различить конечные состояния, тогда надо сперва сложить амплитуды вероятностей, а уж потом вычислять квадрат модуля и находить самую вероятность. Заметьте особенно, что если бы вы попытались представить нейtron в виде отдельной волны, то получили бы одно и то же распределение и для рассеяния нейтронов, вращающихся спином вниз, и для нейтронов, вращающихся спином вверх. Вы должны были бы сказать, что «волна» нейтронов со спином, направленным вниз, пришла ото всех различных атомов и интерферирует так же, как это делает одинаковая по длине волна нейтронов со спином, направленным вверх. Но мы знаем, что на самом деле это не так. Так что (мы уже это отмечали) нужно быть осторожным и не представлять себе чересчур реально волны в пространстве. Они полезны для некоторых задач. Но не для всех.

§ 4. Тождественные частицы

Очередной опыт, который мы хотим описать, продемонстрирует одно из замечательных следствий квантовой механики. В нем снова встречаются такие физические события, в которых существуют два *неразличимых* пути и, как *всегда* при таких обстоятельствах, возникает интерференция амплитуд. Мы собираемся рассмотреть рассеяние одних ядер на других при сравнительно низкой энергии. Начнем, скажем, с α -частиц (это, как вы знаете, просто ядра гелия), бомбардирующих кислород. Чтобы облегчить анализ реакции, проведем его в системе центра масс, в которой скорости ядра кислорода и α -частицы перед столкновением противоположны, а после столкновения тоже противоположны (фиг. 1.7, а). (Величины скоростей, конечно, различны, поскольку массы различны.) Предположим также, что энергия сохраняется и что энергия столкновения настолько мала, что частицы ни раскальваются, ни переходят в возбужденное состояние. Причина, отчего частицы отклоняют друг друга, состоит попросту в том, что обе они заряжены положительно и, выражаясь классически, отталкиваются, проходя одна мимо другой. Рассеяние на разные углы будет происходить с различной вероятностью, и мы хотим выяснить угловую зависимость подобного рассеяния. (Конечно, все это можно рассчитать классически, и по удивительной случайности оказалось, что ответ на этот



Фиг. 1.7. Рассеяние α -частиц на ядрах кислорода, наблюдаемое в системе центра масс.

вопрос в квантовой механике и в классической — один и тот же. Это очень занятно, потому что ни при каком законе сил, кроме закона обратных квадратов, так не бывает, стало быть, это и впрямь случайность.)

Вероятность рассеяния в разных направлениях можно измерить в опыте, изображенном на фиг. 1.7, а. Счетчик в положении D_1 может быть сконструирован так, чтобы детектировать только α -частицы; счетчик в положении D_2 может быть устроен так, чтобы детектировать кислород просто для проверки. (В системе центра масс детекторы должны смотреть друг на друга, в лабораторной — нет.) Опыт заключается в измерении вероятности рассеяния в разных направлениях. Обозначим через $f(\theta)$ амплитуду рассеяния в счетчики, когда они расположены под углом θ ; тогда $|f(\theta)|^2$ — наша экспериментально определяемая вероятность.

Можно было бы провести и другой опыт, в котором наши счетчики реагировали бы и на α -частицу, и на ядро кислорода. Тогда нужно сообразить, что будет, если мы решим не заботиться о том, какая из частиц попала в счетчик. Разумеется, когда кислород летит в направлении θ , то с противоположной стороны, под углом $(\pi - \theta)$, должна оказаться α -частица (фиг. 1.7, б). Значит, если $f(\theta)$ — амплитуда рассеяния кислорода на угол θ , то $f(\pi - \theta)$ — это амплитуда рассеяния α -частицы на угол θ^* . Таким образом, вероятность того, что *какая-то*

* Вообще-то направление рассеяния должно, конечно, описываться двумя углами — полярным углом ϕ и азимутом θ . Тогда следовало бы сказать, что рассеяние кислорода в направлении (θ, ϕ) означает, что α -частица движется в направлении $(\pi - \theta, \phi + \pi)$. Однако для кулоновского рассеяния (и многих других случаев) амплитуда рассеяния не зависит от ϕ . Тогда амплитуда того, что кислород полетел под углом θ , совпадает с амплитудой того, что α -частица полетела под углом $(\pi - \theta)$.

частица окажется в счетчике, который находится в положении D_1 , равна

$$\text{Вероятность попадания какой-то частицы в счетчик } D_1 = |f(\theta)|^2 + |f(\pi - \theta)|^2. \quad (1.14)$$

Заметьте, что в принципе оба состояния различимы. Даже если в этом опыте мы их *не различали*, мы могли бы это сделать. И в соответствии с нашими прежними рассуждениями мы, стало быть, должны складывать вероятности, а не амплитуды.

Приведенный выше результат справедлив для многих ядер. Мишенью здесь могут служить и кислород, и углерод, и бериллий, и водород. Но он неверен при рассеянии α -частиц на α -частицах. В том единственном случае, когда обе частицы в точности одинаковы, экспериментальные данные не согласуются с предсказаниями формулы (1.14). Например, вероятность рассеяния на угол 90° в точности вдвое больше предсказанной вышеизложенной теорией — с частицами, являющимися ядрами «гелия», номер не проходит. Если мишень из He^3 , а налетают на нее α -частицы (He^4), то все хорошо. И только когда мишень из He^4 , т. е. ее ядра тождественны падающим α -частицам, только тогда рассеяние меняется с углом каким-то особым образом.

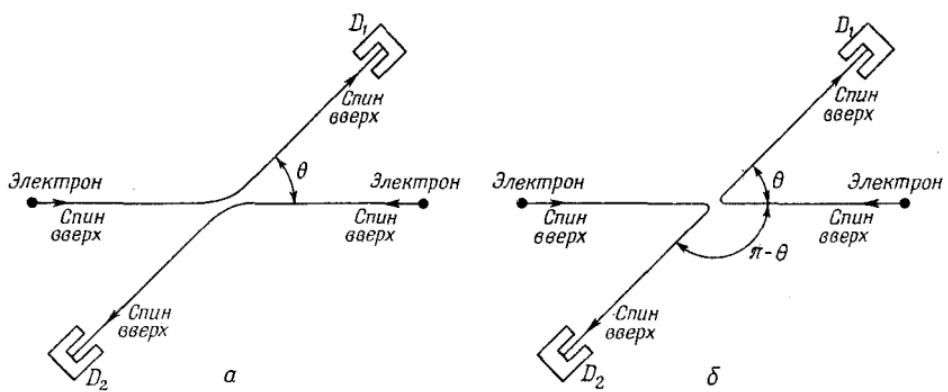
Быть может, вы уже догадались, в чем дело? В счетчике α -частица может очутиться по двум причинам: либо из-за рассеяния налетевшей α -частицы на угол θ , либо из-за рассеяния ее на угол $(\pi - \theta)$. Как мы можем удостовериться, кто попал в счетчик — частица-снаряд или частица-мишень? Никак. В случае рассеяния α -частиц на α -частицах существуют две альтернативы, различить которые нельзя. Приходится дать *амплитудам* вероятности интерферировать при помощи сложения, и вероятность обнаружить в счетчике α -частицу есть квадрат этой суммы:

$$\text{Вероятность того, что } \alpha\text{-частица обнаружится в счетчике } D_1 = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2. \quad (1.15)$$

Это совсем не то, что (1.14). Возьмите, скажем, угол $\pi/2$ (это легче себе представить). При $\theta = \pi/2$ мы, естественно, имеем $f(\theta) = f(\pi - \theta)$, так что из (1.15) вероятность оказывается равной

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

А с другой стороны, если бы не было интерференции, формула (1.14) дала бы только $2 |f(\pi/2)|^2$. Так что на угол 90° рассеивается вдвое больше частиц, чем можно было ожидать. Конечно, и под другими углами результаты будут другие. И мы приходим к необычному выводу: когда частицы тождественны, происходит нечто новое, чего не бывало, когда частицы можно было друг от друга отличить. При математическом описании



Фиг. 1.8. Рассеяние электронов на электронах.

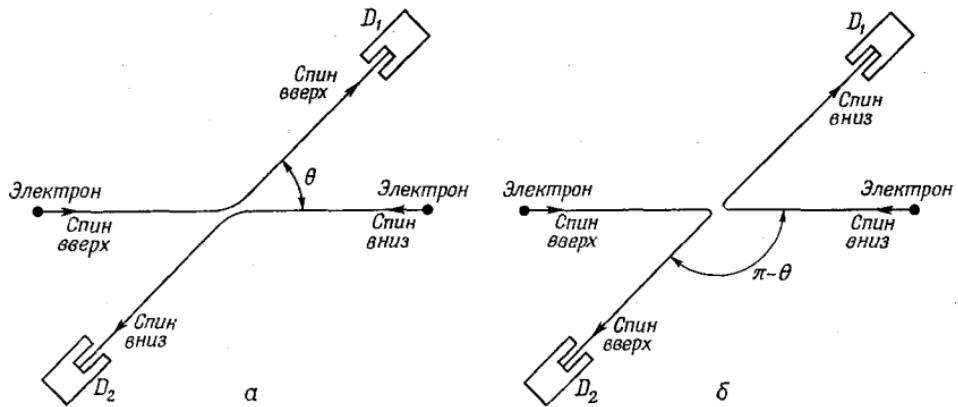
Если спины сталкивающихся электронов параллельны, то процессы а и б неразличимы.

вы обязаны складывать амплитуды взаимоисключающих процессов, в которых обе частицы просто обмениваются ролями, и происходит интерференция.

Еще более неожиданное явление происходит с рассеянием электронов на электронах или протонов на протонах. Тогда не верен ни один из прежних результатов! Для этих частиц мы должны призвать на помощь совершенно новое правило: если попадающий в некоторую точку электрон обменивается своей индивидуальностью с другим электроном, то новая амплитуда интерферирует со старой в *противофазе*. Это все равно интерференция, но с обратным знаком. В случае α -частиц, когда происходит обмен α -частицами, достигающими счетчика, амплитуды интерферируют с одним и тем же знаком. А в случае электронов амплитуды обмена интерферируют с разными знаками. С точностью до одной детали, о которой будет сейчас сказано, правильная формула для электронов в опыте, подобном изображенному на фиг. 1.8, такова:

$$\text{Вероятность обнаружить электрон в счетчике } D_1 = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2. \quad (1.16)$$

Это утверждение нуждается в уточнении, потому что мы не учли спин электрона (у α -частиц спина нет). Спин электрона можно считать направленным либо вверх, либо вниз по отношению к плоскости рассеяния. Если энергия в опыте достаточно низка, то магнитные силы, возникающие от токов, будут малы и не повлияют на спин. Предположим в нашем анализе, что так оно и есть, так что нет шансов, чтобы спины при столкновении перевернулись. Какой бы спин у электрона ни был, он уносит его с собой. Мы видим теперь, что есть много возможностей. У частицы-снаряда и частицы-мишени оба спина могут



Фиг. 1.9. Рассеяние электронов с антипараллельными спинами.

быть направлены вверх, или вниз, или в разные стороны. Если они оба направлены вверх, как на фиг. 1.8 (или оба — вниз), то после рассеяния останется то же самое, и амплитуда процесса будет разностью амплитуд тех двух возможностей, которые показаны на фиг. 1.8. Вероятность обнаружить электрон в счетчике D_1 тогда будет даваться формулой (1.16).

Предположим, однако, что у «снаряда» спин направлен вверх, а у «мишени» — вниз. У электрона, попавшего в счетчик D_1 , спин может оказаться либо направленным вверх, либо — вниз, и, измеряя этот спин, мы можем сказать, выскоцил ли этот электрон из бомбардирующего пучка или же из мишени. Эти две возможности показаны на фиг. 1.9; в принципе они различны, и поэтому интерференции не получится, просто сложатся две

Таблица 1.1 • РАССЕЯНИЕ НЕПОЛЯРИЗОВАННЫХ ЧАСТИЦ СО СПИНОМ $\frac{1}{2}$

Доля случаев	Спин частицы до столкновения		Спин частицы в счетчике		Вероятность
	1	2	D_1	D_2	
$\frac{1}{4}$	Вверх	Вверх	Вверх	Вверх	$ f(\theta) - f(\pi - \theta) ^2$
$\frac{1}{4}$	Вниз	Вниз	Вниз	Вниз	$ f(\theta) - f(\pi - \theta) ^2$
$\frac{1}{4}$	Вверх	Вниз	{	Вверх	Вниз
				Вниз	Вверх
$\frac{1}{4}$	Вниз	Вверх	{	Вверх	Вниз
				Вниз	Вверх

$$\text{Полная вероятность} = \frac{1}{2} |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 + \frac{1}{2} |f(\theta)|^2 + \frac{1}{2} |f(\pi - \theta)|^2.$$

вероятности. Все это верно и тогда, когда оба первоначальных спина перевернуты, т. е. если спин слева смотрит вниз, а спин справа — вверх.

Наконец, если электроны вылетают случайно (например, они вылетают из накаленной вольфрамовой нити полностью неполяризованным пучком), то с равной вероятностью каждый отдельный электрон вылетит либо спином вверх, либо спином вниз. Если мы не собираемся в нашем опыте измерять в какой-нибудь точке спин электронов, то получается то, что называют экспериментом с неполяризованными частицами. Результат этого эксперимента лучше всего подсчитать, перечислив все возможные возможности, как это сделано в табл. 1.1. Для каждой различимой альтернативы отдельно подсчитана *вероятность*. Тогда полная вероятность есть сумма всех отдельных вероятностей. Заметьте, что для неполяризованных пучков результат при $\theta = \pi/2$ составляет половину классического результата для независимых частиц.

Поведение тождественных частиц приводит ко многим интересным следствиям; в следующей главе мы обсудим их подробнее.

ТОЖДЕСТВЕННЫЕ ЧАСТИЦЫ

§ 1. Бозе-частицы
и ферми-частицы

§ 2. Состояния с двумя
бозе-частицами

§ 3. Состояния с и
бозе-частицами

§ 4. Излучение
и поглощение
фотонов

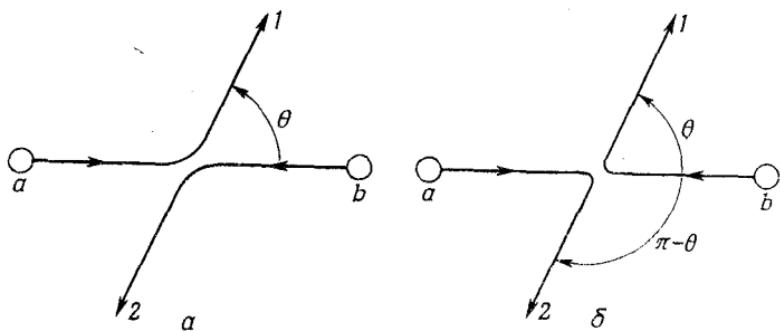
§ 5. Спектр абсолютно
чёрного тела

§ 6. Жидкий гелий

§ 7. Принцип замыкания
цикла (выв. 4) «Броуновское движение» (об излучении
и поглощении абсолютно
чёрного тела);
гл. 42 (выв. 4)
«Применение
кинетической теории»

В предыдущей главе мы начали рассматривать особые правила, по которым происходит интерференция в процессах с двумя тождественными частицами. Тождественными мы считаем такие частицы, которые, подобно электронам, никак невозможно отличить друг от друга. Если в процессе имеются две тождественные частицы, то замена той, которая повернула к счетчику, на другую — это неотличаемая альтернатива, которая, как и во всех случаях неотличимых альтернатив, интерферирует с первоначальным случаем, когда обмена не было. Амплитудой события тогда служит сумма двух интерферирующих амплитуд, и существенно, что в одних случаях интерференция происходит в *фазе*, а в других — в *противофазе*.

Представим, что сталкиваются две частицы *a* и *b* и частица *a* рассеивается в направлении 1, а частица *b* — в направлении 2 (фиг. 2.1, *a*). Пусть $f(\theta)$ будет амплитуда этого процесса; тогда вероятность P_1 наблюдения подобного события пропорциональна $|f(\theta)|^2$. Конечно, могло случиться, что частица *b* рассеялась в счетчик 1, а частица *a* направилась в счетчик 2 (фиг. 2.1, *б*). Если считать, что никаких специальных направлений, определяемых спином или чем-то подобным, в опыте нет, то вероятность P_2 этого события можно просто записать в виде $|f(\pi - \theta)|^2$, потому что этот процесс попросту эквивалентен первому процессу, в котором счетчик 1 поставили под углом $(\pi - \theta)$. И вам могло бы показаться, что *амплитуда* второго процесса равна просто $f(\pi - \theta)$. Но это не обязательно так, потому что в ней мог стоять



Фиг. 2.1. При рассеянии двух тождественных частиц процессы *a* и *b* неразличимы.

произвольный фазовый множитель. Иначе говоря, амплитуда могла бы быть такой:

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

Ведь и такая амплитуда все еще приводит к вероятности P_2 , равной $|f(\pi - \theta)|^2$.

Посмотрим теперь, что случается, если частицы *a* и *b* оказываются идентичными. Тогда два разных процесса, показанных на двух частях фиг. 2.1, уже нельзя друг от друга отличить. Существует амплитуда того, что *a* или *b* попадает в счетчик 1, тогда как оставшаяся частица попадает в счетчик 2. Эта амплитуда есть сумма амплитуд двух процессов, показанных на фиг. 2.1.

Если первую мы обозначим $f(\theta)$, то вторая будет $e^{i\delta} f(\pi - \theta)$, и теперь уже фазовый множитель очень важен, потому что мы собираемся складывать амплитуды. Предположим, что мы обязаны умножать амплитуду на некий фазовый множитель всякий раз, когда две частицы обмениваются ролями. Если они еще раз обменяются ими, то множитель появится еще раз. Но при этом мы снова возвратимся к первому процессу. Фазовый множитель, взятый дважды, должен вернуть нас к тому, с чего мы начали, — его квадрат должен быть равен единице. Есть только две возможности: $e^{i\delta}$ равно либо $+1$, либо -1 . Обмен приводит ко вкладу в амплитуду с *тем же* знаком или ко вкладу с *противоположным* знаком. И оба случая встречаются в природе, каждый для своего класса частиц. Частицы, интерферирующие с *положительным* знаком, называются *бозе-частицами*, а те, которые интерферируют с *отрицательным* знаком, именуются *ферми-частицами*. Ферми-частицы — это электрон, мюон, оба нейтрино, нуклоны и барионы. Стало быть, амплитуда рассея-

ния тождественных частиц имеет вид

для бозе-частиц:

$$(\text{Амплитуда процесса}) + (\text{Амплитуда обмена}); \quad (2.1)$$

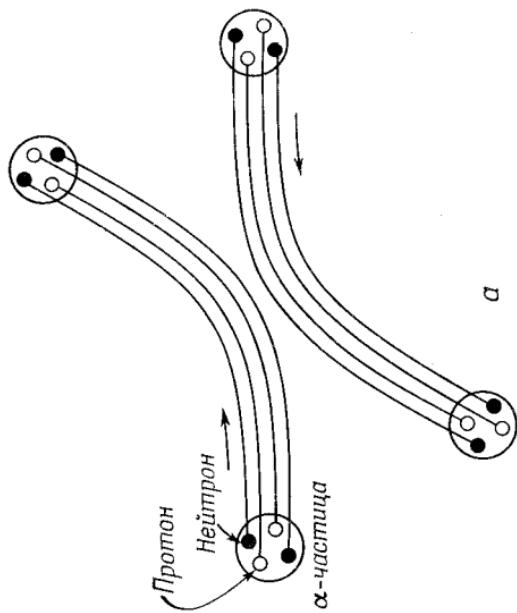
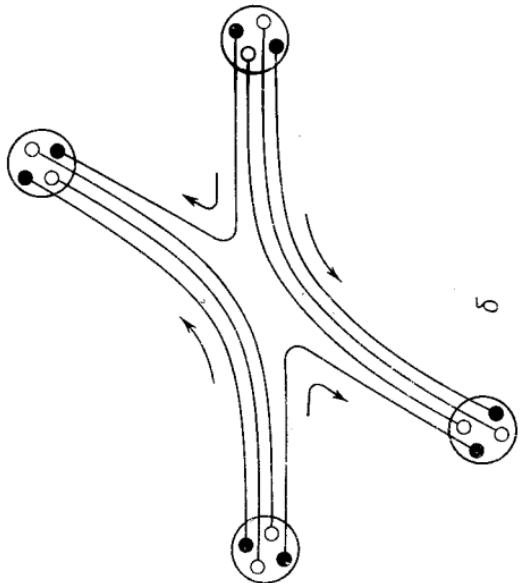
для ферми-частиц:

$$(\text{Амплитуда процесса}) - (\text{Амплитуда обмена}). \quad (2.2)$$

Для частиц со спином (скажем, электронов) возникает добавочное усложнение. Нужно указывать не только местоположение частиц, но и направление их спинов. Только в том случае, когда частицы идентичны и их *спиновые состояния тоже идентичны*, только тогда при обмене частицами амплитуды интерферируют. А если вас интересует рассеяние неполяризованных пучков, являющихся смесью различных спиновых состояний, то нужны еще выкладки и сверх этого.

Интересная проблема возникает при наличии двух или больше тесно связанных частиц. К примеру, в α -частице сидят четыре частицы: два нейтрона и два протона. И когда рассеиваются две α -частицы, может представиться несколько возможностей. Может случиться, что при рассеянии обнаружится конечная амплитуда того, что один из нейтронов перескочит от одной α -частицы к другой, а нейtron из другой α -частицы перейдет к первой, так что две α -частицы после рассеяния оказываются не первоначальными частицами — произошел обмен парой нейтронов (фиг. 2.2). Амплитуда рассеяния с обменом парой нейтронов будет интерферировать с амплитудой рассеяния без такого обмена, и интерференция должна иметь знак минус, потому что состоялся обмен ферми-частицами. С другой стороны, если относительная энергия двух α -частиц так мала, что они находятся сравнительно далеко друг от друга (скажем, из-за кулоновского отталкивания) и вероятность обмена любыми внутренними частицами оказывается незначительной, в этом случае α -частицу можно считать простейшим объектом, не задумываясь о деталях ее внутреннего строения. В этих условиях в амплитуду рассеяния войдут только два члена. Либо обмена вовсе нет, либо при рассеянии происходит обмен всеми четырьмя нуклонами. Поскольку и протоны, и нейтроны в α -частице — это ферми-частицы, обмен любой парой меняет знак амплитуды рассеяния. Пока внутри α -частиц нет никаких изменений, обмен двумя α -частицами означает то же самое, что обмен четырьмя парами ферми-частиц. Каждая пара меняет знак, и в итоге амплитуды складываются со знаком плюс. Так что α -частица ведет себя как бозе-частица.

Значит, правило состоит в том, что сложные объекты в тех обстоятельствах, когда их можно считать неделимыми объектами, ведут себя как бозе- или ферми-частицы, смотря по тому, содержится ли в них четное или нечетное число ферми-частиц.



Фиг. 2.9. Рассеяние деля а-частиц.
а — обе частицы сохраняют свою индивидуальность; б — во время рассеяния происходит обмен нейтроном.

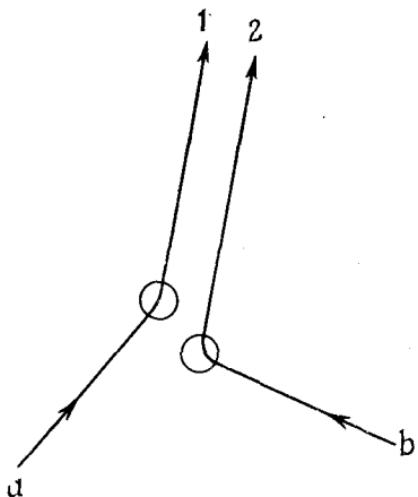
Все элементарные ферми-частицы, о которых мы упоминали (такие, как электрон, протон, нейtron и т. д.), обладают спином $j = \frac{1}{2}$. Если несколько таких ферми-частиц образует сложный объект, общий их спин может быть либо целым, либо полуцелым. К примеру, у самого распространенного изотопа гелия He^4 , в котором два протона и два нейтрона, спин равен нулю, а у Li^7 , в котором протонов три, а нейтронов четыре, спин равен $\frac{3}{2}$. Позже мы выучим правила сложения моментов количества движения, а пока просто заметим, что всякий сложный объект с *полуцелым* спином имитирует *ферми-частицу*, тогда как всякий сложный объект с *целым* спином имитирует *бозе-частицу*.

Интересно, отчего так получается? Отчего частицы с полуцелым спином суть ферми-частицы, чьи амплитуды складываются со знаком минус, а частицы с целым спином суть бозе-частицы, чьи амплитуды складываются с положительным знаком? Мы просим прощения за то, что неспособны элементарно объяснить вам это. Но объяснение существует, его нашел Паули, основываясь на сложных доводах квантовой теории поля и теории относительности. Он показал, что эти факты с необходимостью связаны друг с другом; но мы не в состоянии найти способ воспроизвести его аргументы на элементарном уровне. Это, видимо, одно из немногих мест в физике, когда правило формулируется очень просто, хотя столь же простого объяснения ему не найдено. Объяснение коренится глубоко в релятивистской квантовой механике. По-видимому, это означает, что мы до конца не понимаем лежащего в его основе принципа. Будем считать его пока одним из законов Вселенной.

§ 2. Состояния с двумя бозе-частицами

Теперь мы хотели бы обсудить интересное следствие из правила сложения для бозе-частиц. Оно касается поведения этих частиц, когда их не одна, а несколько. Начнем с рассмотрения случая рассеяния двух бозе-частиц на двух различных рассеивателях. Нас интересуют не детали механизма рассеяния, а лишь одно: что происходит с рассеянными частицами. Пусть перед нами случай, показанный на фиг. 2.3. Частица a , рассеявшись, оказалась в состоянии 1. Под *состоянием* мы подразумеваем данное направление и энергию или какие-нибудь другие заданные условия. Частица b рассеялась в состояние 2. Предположим, что состояния 1 и 2 почти одинаковы. (На самом же деле мы хотели бы получить амплитуду того, что две частицы рассеялись в одном и том же направлении или в одно и то же состояние, но лучше будет, если мы сперва подумаем над тем, что произойдет, если состояния будут почти одинаковыми, а затем выведем отсюда, что бывает при их полном совпадении.)

Фиг. 2.3. Двойное рассеяние в близкие конечные состояния.



Пусть у нас была бы только частица a ; тогда у нее была бы определенная амплитуда рассеяния в направлении 1, скажем $\langle 1 | a \rangle$. А частица b сама по себе обладала бы амплитудой $\langle 2 | b \rangle$ того, что приземление произойдет в направлении 2. Если частицы не тождественны, то амплитуда того, что в одно и то же время произойдут оба рассеяния, равна попросту произведению

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

Вероятность же такого события тогда равна

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

что также равняется

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

Чтобы сократить запись, мы иногда будем полагать

$$\langle 1 | a \rangle = a_1, \quad \langle 2 | b \rangle = b_2.$$

Тогда вероятность двойного рассеяния есть

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

Могло бы также случиться, что частица b рассеялась в направлении 1, а частица a — в направлении 2. Амплитуда такого процесса была бы равна

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

а вероятность такого события равна

$$|\langle 2 | a \rangle \langle 1 | b \rangle|^2 = |a_2|^2 |b_1|^2.$$

Представим себе теперь, что имеется пара крошечных счетчиков, которые ловят рассеянные частицы. Вероятность P_2 того, что они засекут сразу обе частицы, равна просто

$$P_2 = |a_1|^2 |b_2|^2 + |a_2|^2 |b_1|^2. \quad (2.3)$$

Положим теперь, что направления 1 и 2 очень близки. Будем считать, что a с изменением направления меняется плавно,

тогда a_1 и a_2 при сближении направлений 1 и 2 должны приближаться друг к другу. При достаточном сближении амплитуды a_1 и a_2 сравняются, и можно будет положить $a_1 = a_2$ и обозначить каждую из них просто a ; точно так же мы положим и $b_1 = b_2 = b$. Тогда получим

$$P_2 = 2 |a|^2 |b|^2. \quad (2.4)$$

Теперь, однако, предположим, что a и b — тождественные бозе-частицы. Тогда процесс перехода a в состояние 1, а b в состояние 2 нельзя будет отличить от обменного процесса, в котором b переходит в 2, а a — в 1. В этом случае амплитуды двух различных процессов могут интерферировать. Полная амплитуда того, что в каждом из счетчиков появится по частице, равна

$$\langle 1 | a \rangle \langle 2 | b \rangle + \langle 2 | a \rangle \langle 1 | b \rangle, \quad (2.5)$$

и вероятность того, что ими будет зарегистрирована пара, дается квадратом модуля этой амплитуды:

$$P_2 = |a_1 b_2 + a_2 b_1|^2 = 4 |a|^2 |b|^2. \quad (2.6)$$

В итоге выясняется, что *вдвое более вероятно* обнаружить две *идентичные* бозе-частицы, рассеянные в одно и то же состояние, по сравнению с *расчетом, проводимым в предположении, что частицы различны*.

Хотя мы считали, что частицы наблюдаются двумя разными счетчиками, — это несущественно. В этом можно убедиться следующим образом. Вообразим себе, что оба направления 1 и 2 привели бы частицы в *один и тот же* маленький счетчик, который находится на каком-то расстоянии. Мы определим направление 1, говоря, что оно смотрит в элемент поверхности dS_1 счетчика. Направление же 2 смотрит в элемент поверхности dS_2 счетчика. (Считается, что счетчик представляет собой поверхность, поперечную к линии рассеяния.) Теперь уже нельзя говорить о вероятности того, что частица направится точно в каком-то направлении или в *определенную* точку пространства. Это невозможно — шанс зарегистрировать любое фиксированное направление равен нулю. Если уж нам хочется точности, то нужно так определить наши амплитуды, чтобы они давали вероятность попадания на *единицу площади* счетчика. Пусть у нас была бы только одна частица a ; она бы имела определенную амплитуду рассеяния в направлении 1. Пусть $\langle 1 | a \rangle = a_1$ определяется как амплитуда того, что a рассеивается в *единицу площади* счетчика, расположенного в направлении 1. Иными словами, мы выбираем масштаб a_1 и говорим, что она «нормирована» так, что вероятность того, что a рассеивается в *элемент площади* dS_1 , равна

$$|\langle 1 | a \rangle|^2 dS_1 = |a_1|^2 dS_1. \quad (2.7)$$

Если вся площадь нашего счетчика ΔS и мы заставим dS_1 странствовать по этой площади, то полная вероятность того, что частица a рассеется в счетчик, будет

$$\int_{\Delta S} |a_1|^2 dS_1. \quad (2.8)$$

Как и прежде, мы хотим считать счетчик настолько малым, что амплитуда a_1 на его поверхности не очень меняется; значит, a_1 будет постоянным числом, и мы обозначим его через a . Тогда вероятность того, что частица a рассеялась куда-то в счетчик, равна

$$p_a = |a|^2 \Delta S. \quad (2.9)$$

Таким же способом мы приедем к выводу, что частица b (когда она одна) рассеивается в элемент площади dS_2 с вероятностью

$$|b_2|^2 dS_2.$$

(Мы говорим dS_2 , а не dS_1 , в расчете на то, что позже частичам a и b будет разрешено двигаться в разных направлениях.) Опять положим b_2 равным постоянной амплитуде b ; тогда вероятность того, что частица b будет зарегистрирована счетчиком, равна

$$p_b = |b|^2 \Delta S. \quad (2.10)$$

Когда же имеются две частицы, то вероятность рассеяния a в dS_1 и b в dS_2 будет

$$|a_1 b_2|^2 dS_1 dS_2 = |a|^2 |b|^2 dS_1 dS_2. \quad (2.11)$$

Если нам нужна вероятность того, что *обе* частицы (и a , и b) попали в счетчик, мы должны будем проинтегрировать dS_1 и dS_2 по всей площади ΔS ; получится

$$P_2 = |a|^2 |b|^2 (\Delta S)^2. \quad (2.12)$$

Заметим, кстати, что это равно просто $p_a \cdot p_b$ в точности так, как если бы мы предположили, что частицы a и b действуют независимо друг от друга.

Однако, когда две частицы тождественны, имеются две неразличимые возможности для каждой пары элементов поверхности dS_1 и dS_2 . Частица a , попадающая в dS_2 , и частица b , попадающая в dS_1 , неотличимы от a в dS_1 и от b в dS_2 , так что амплитуды этих процессов будут интерферировать. (Когда у нас были две *различные* частицы, то, хотя мы *на самом деле* не заботились о том, какая из них куда попадает в счетчике, мы все же *в принципе* могли это узнать; так что интерференции не было. А для тождественных частиц мы и в *принципе* не можем этого сделать.) Мы должны тогда написать, что вероятность того,

что пара частиц очутится в dS_1 и dS_2 , есть

$$|a_1 b_2 + a_2 b_1|^2 dS_1 dS_2. \quad (2.13)$$

Однако сейчас, интегрируя по поверхности счетчика, нужно быть осторожным. Пустив dS_1 и dS_2 странствовать по всей площасти ΔS , мы бы сосчитали каждую часть площасти дважды, поскольку в (2.13) входит все, что может случиться* с каждой парой элементов поверхности dS_1 и dS_2 . Но интеграл можно все равно подсчитать, если учесть двухкратный счет, разделив результат пополам. Тогда мы получим, что P_2 для тождественных бозе-частиц есть

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

И опять это ровно вдвое больше того, что мы получили в (2.12) для различных частиц.

Если вообразить на мгновение, что мы откуда-то знали, что канал b уже послал свою частицу в своем направлении, то можно сказать, что вероятность того, что вторая частица направится в ту же сторону, вдвое больше того, чего можно было бы ожидать, если бы мы посчитали это событие независимым. Таково уж свойство бозе-частиц, что если есть одна частица в каких-то условиях, то вероятность поставить в те же условия вторую вдвое больше, чем если бы первой там не было. Этот факт часто формулируют так: если уже имеется одна бозе-частица в данном состоянии, то амплитуда того, что туда же, ей на голову, можно будет поместить вторую, в $\sqrt{2}$ раз больше, чем если бы первой там не было. (Это неподходящий способ формулировать результат с той физической точки зрения, какую мы избрали, но, если это правило последовательно применять, оно все же приводит к верному результату.)

§ 3. Состояния с n бозе-частицами

Распространим наш результат на тот случай, когда имеются n частиц. Вообразим случай, изображенный на фиг. 2.4. Есть n частиц a, b, c, \dots , которые рассеиваются в направлениях $1, 2, 3, \dots, n$. Все n направлений смотрят в небольшой счетчик, который стоит где-то поодаль. Как и в предыдущем параграфе, выберем нормировку всех амплитуд так, чтобы вероятность того, что каждая частица, действуя по отдельности, попадет в

* Перестановка dS_1 и dS_2 в (2.11) приводит к другому событию, так что оба элемента поверхности обязаны пройтись по всей площасти счетчика. В (2.13) мы рассматриваем dS_1 и dS_2 как пару и включаем все, что может случиться. Если интегралы опять включают все, что случится, когда dS_1 и dS_2 поменяются местами, то все считается дважды.

Фиг. 2.4. Рассеяние *n* частиц в близкие конечные состояния.

элемент поверхности dS счетчика, была равна

$$|\langle \dots \rangle|^2 dS.$$

Сперва предположим, что частицы все различны, тогда вероятность того, что n частиц будут одновременно зарегистрированы в n разных элементах поверхности, будет равна

$$|a_1 b_2 c_3 \dots|^2 dS_1 dS_2 dS_3 \dots \quad (2.15)$$

Опять примем, что амплитуды не зависят от того, где в счетчике расположен элемент dS (он считается малым), и обозначим их просто a, b, c, \dots . Вероятность (2.15) обратится в

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

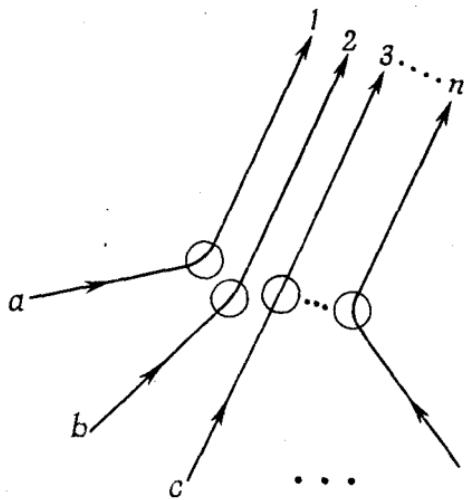
Прогоняя каждый элемент dS по всей поверхности ΔS счетчика, получаем, что P_n (разные) — вероятность одновременно зарегистрировать n разных частиц — равна

$$P_n(\text{разные}) = |a|^2 |b|^2 |c|^2 \dots (\Delta S)^n. \quad (2.17)$$

Это просто произведение вероятностей попаданий в счетчик каждой из частиц по отдельности. Все они действуют независимо — вероятность попасть для одной из них не зависит от того, сколько других туда попало.

Теперь предположим, что все эти частицы — идентичные бозе-частицы. Для каждой совокупности направлений 1, 2, 3, ... существует много неразличимых возможностей. Если бы, скажем, частиц было только три, появились бы следующие возможности:

$a \rightarrow 1$	$a \rightarrow 1$	$a \rightarrow 2$
$b \rightarrow 2$	$b \rightarrow 3$	$b \rightarrow 1$
$c \rightarrow 3$	$c \rightarrow 2$	$c \rightarrow 3$
$a \rightarrow 2$	$a \rightarrow 3$	$a \rightarrow 3$
$b \rightarrow 3$	$b \rightarrow 1$	$b \rightarrow 2$
$c \rightarrow 1$	$c \rightarrow 2$	$c \rightarrow 1$



Возникает шесть различных комбинаций. А если частиц n , то будет $n!$ разных, хотя и не отличимых друг от друга, комбинаций; их амплитуды положено складывать. Вероятность того, что n частиц будут зарегистрированы в n элементах поверхности, тогда будет равна

$$|a_1 b_2 c_3 \dots + a_1 b_3 c_2 \dots + \text{и т. д.} +|^2 dS_1 dS_2 dS_3 \dots dS_n. \quad (2.18)$$

И снова мы предположим, что все направления столь близки друг к другу, что можно будет положить $a_1 = a_2 = \dots = a_n = a$ и то же сделать с b, c, \dots ; вероятность (2.18) обратится в

$$|n! abc \dots|^2 dS_1 dS_2 \dots dS_n. \quad (2.19)$$

Когда каждый элемент dS прогоняют по площади ΔS счетчика, то всякое мыслимое произведение элементов поверхности считается $n!$ раз; учтем это, разделив на $n!$, и получим

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

или

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

Сравнивая это с (2.17), видим, что вероятность совместного счета n бозе-частиц в $n!$ раз больше, чем получилось бы в предположении, что все частицы различны. Все это можно подытожить так:

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

Итак, вероятность в случае бозе-частиц в $n!$ раз больше, чем вы получили бы, считая, что частицы действовали независимо.

Мы лучше поймем, что это значит, если спросим: почему равна вероятность того, что бозе-частица перейдет в некоторое состояние, в котором уже находятся n других частиц? Обозначим добавленную частицу буквой w . Если всего, включая w , имеется $(n+1)$ частиц, то (2.20) обращается в

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

Это можно записать так:

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

или

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

Этот результат можно истолковать следующим образом. Число $|w|^2 \Delta S$ — это вероятность заполучить в счетчик частицу w , если никаких других частиц нет; $P_n(\text{бозе})$ — это шанс того, что там уже есть n других бозе-частиц. Значит, (2.23)

говорит нам, что *когда* у нас уже есть n других идентичных друг другу бозе-частиц, то вероятность того, что *еще одна* частица придет в то же состояние, усиливается в $(n + 1)$ раз. Вероятность получить еще один бозон там, где уже есть *их* n штук, в $(n + 1)$ раз больше той, какая была бы, если бы там раньше ничего не было. *Наличие* других частиц *увеличивает* вероятность заполучить еще одну.

§ 4. Излучение и поглощение фотонов

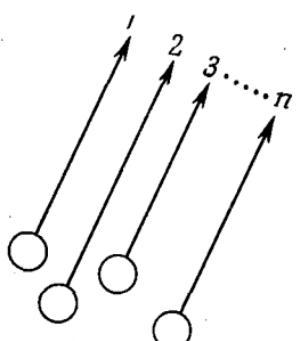
Повсюду в наших рассуждениях шла речь о процессе, похожем на рассеяние α -частиц. Но это необязательно; можно было бы говорить и о создании частиц, например об излучении света. При излучении света «создается» фотон. В этом случае уже не нужны на фиг. 2.4 входящие линии; можно просто считать, что есть n атомов a, b, c, \dots , излучающих свет (фиг. 2.5). Значит, наш результат можно сформулировать и так: *вероятность того, что атом излучит фотон в некотором конечном состоянии, увеличивается в $(n + 1)$ раз, если в этом состоянии уже есть n фотонов.*

Многим больше нравится высказывать этот результат иначе; они говорят, что *амплитуда* испускания фотона *увеличивается* в $\sqrt{n + 1}$ раз, если уже имеется в наличии n фотонов. Разумеется, это просто другой способ сказать то же самое, если только иметь в виду, что эту амплитуду для получения вероятности надо просто *возвести в квадрат*.

В квантовой механике справедливо в общем случае утверждение о том, что амплитуда получения состояния χ из любого другого состояния φ комплексно сопряжена амплитуде получения φ из χ

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \langle \varphi | \chi \rangle^*. \quad (2.24)$$

Мы разберемся в этом чуть позже, а пока просто предположим, что на самом деле это так. Тогда этим можно воспользоваться, чтобы понять, как фотоны рассеиваются или поглощаются из



Фиг. 2.5. Образование n фотонов в близких состояниях.

данного состояния. Мы знаем, что амплитуда того, что фотон прибавится к какому-то состоянию, скажем к i , в котором уже находится n фотонов, равна

$$\langle n+1 | n \rangle = \sqrt{n+1} a, \quad (2.25)$$

где $a = \langle i | a \rangle$ — амплитуда, когда нет других фотонов. Если воспользоваться формулой (2.24), то амплитуда обратного перехода — от $(n+1)$ фотонов к n фотонам — равна

$$\langle n | n+1 \rangle = \sqrt{n+1} a^*. \quad (2.26)$$

Но обычно говорят иначе; людям не нравится думать о переходе от $(n+1)$ к n , они всегда предпочитают исходить из того, что имелось n фотонов. Поэтому говорят, что амплитуда поглощения фотона, если имеется n других, иными словами, перехода от n к $(n-1)$, равна

$$\langle n-1 | n \rangle = \sqrt{n} a^*. \quad (2.27)$$

Это, разумеется, просто та же самая формула (2.26). Но тогда возникает новая забота — помнить, когда пишется \sqrt{n} и когда $\sqrt{n+1}$. Запомнить это можно так: множитель всегда равен корню квадратному из наибольшего числа имевшихся в наличии фотонов, все равно — до реакции или после. Уравнения (2.25) и (2.26) свидетельствуют о том, что закон на самом деле симметричен; несимметрично он выглядит лишь тогда, когда его записывают в виде (2.27).

Из этих новых правил проистекает множество физических следствий; мы хотим привести одно из них, касающееся испускания света. Представим случай, когда фотоны находятся в ящике, — можете вообразить, что ящик имеет зеркальные стеки. Пусть в этом ящике в одном и том же состоянии (с одними и теми же частотой, поляризацией и направлением) имеется n фотонов, так что их нельзя друг от друга отличить, и пусть в ящике имеется атом, который может испустить еще один фотон в таком же состоянии. Тогда вероятность того, что он испустит фотон, равна

$$(n+1) |a|^2, \quad (2.28)$$

а вероятность того, что он фотон поглотит, равна

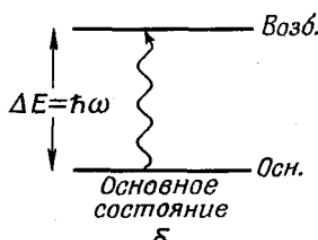
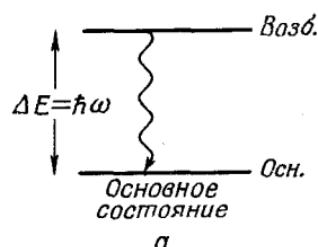
$$n |a|^2, \quad (2.29)$$

где $|a|^2$ — вероятность того, что он испустил бы фотон, если бы не было этих n фотонов. Мы уже говорили об этих правилах немного по-иному в гл. 42 (вып. 4). Выражение (2.29) утверждает, что вероятность того, что атом *поглотит* фотон и совершил переход в состояние с более высокой энергией, пропорциональна интенсивности света, освещдающего его. Но, как впервые указал Эйнштейн, скорость, с которой атом переходит в более

низкое энергетическое состояние, состоит из двух частей. Есть вероятность $|a|^2$ того, что он совершил самопроизвольный переход, и есть вероятность вынужденного перехода $n|a|^2$, пропорциональная интенсивности света, т. е. числу имеющихся фотонов. Далее, как заметил Эйнштейн, коэффициенты поглощения и вынужденного испускания равны между собой и связаны с вероятностью самопроизвольного испускания. Здесь же мы выяснили, что если интенсивность света измеряется количеством имеющихся фотонов (вместо того, чтобы пользоваться энергией в единице объема или в секунду), то коэффициенты поглощения, вынужденного испускания и самопроизвольного испускания все равны друг другу. В этом смысле соотношение между коэффициентами A и B , выведенного Эйнштейном [см. гл. 42 (вып. 4), соотношение (42.18)].

§ 5. Спектр абсолютно черного тела

Мы хотим теперь использовать наши правила для бозе-частиц, чтобы еще раз получить спектр излучения абсолютно черного тела [см. гл. 42 (вып. 4)]. Мы сделаем это, подсчитав, сколько фотонов содержится в ящике, если излучение находится в тепловом равновесии с атомами в ящике. Допустим, что каждой световой частоте ω соответствует определенное количество N атомов с двумя энергетическими состояниями, отличающимися на энергию $\Delta E = \hbar\omega$ (фиг. 2.6). Состояние с меньшей энергией мы назовем «основным», с большей — «возбужденным». Пусть $N_{\text{осн}}$ и $N_{\text{возб}}$ — средние числа атомов в основном и возбужденном состояниях; тогда для теплового равновесия при температуре T из статистической механики



Фиг. 2.6. Излучение и поглощение фотона с частотой ω .

следует

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

Каждый атом в основном состоянии может поглотить фотон и перейти в возбужденное состояние, и каждый атом в возбужденном состоянии может испустить фотон и перейти в основное состояние. При равновесии скорости этих двух процессов должны быть равны. Скорости пропорциональны вероятности событий и количеству имеющихся атомов. Пусть \bar{n} — среднее число фотонов, находящихся в данном состоянии с частотой ω . Тогда скорость поглощения из этого состояния есть $N_{\text{осн}} \bar{n} |a|^2$, а скорость испускания в это состояние есть $N_{\text{возб}} (\bar{n} + 1) |a|^2$. Приравнивая друг другу эти две скорости, мы получаем

$$N_{\text{осн}} \bar{n} = N_{\text{возб}} (\bar{n} + 1). \quad (2.31)$$

Сопоставляя это с (2.30), имеем

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

Отсюда найдем

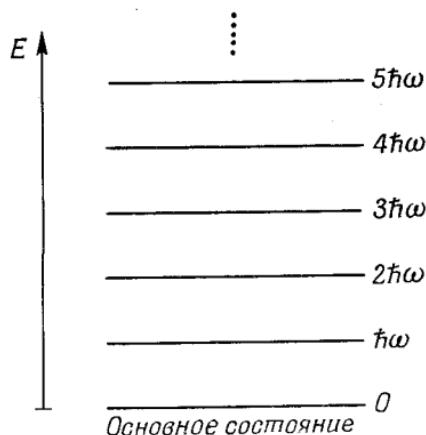
$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/kT} - 1}. \quad (2.32)$$

Это и есть среднее число фотонов в любом состоянии с частотой ω при тепловом равновесии в полости. Поскольку энергия каждого фотона $\hbar\omega$, то энергия фотонов в данном состоянии есть $\bar{n}\hbar\omega$, или

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

Кстати говоря, мы уже получали подобное выражение в другой связи [см. гл. 41 (вып. 4), формула (41.15)]. Вспомните, что для гармонического осциллятора (скажем, грузика на пружинке) квантовомеханические уровни энергии находятся друг от друга на равных расстояниях $\hbar\omega$, как показано на фиг. 2.7. Обозначив энергию n -го уровня через $n\hbar\omega$, мы получили, что средняя энергия такого осциллятора также давалась выражением (2.33). А сейчас это выражение было выведено для фотонов путем подсчета их числа и привело к тому же результату. Перед вами — одно из чудес квантовой механики. Если начать с рассмотрения таких состояний или таких условий для бозе-частиц, когда они друг с другом не взаимодействуют (мы ведь предположили, что фотоны не взаимодействуют друг с другом), а затем считать, что в эти состояния могут быть помещены нуль, или одна, или две и т. д. до n частиц, то оказывается, что эта

Ф и г. 2.7. Уровни энергии гармонического осциллятора.



система ведет себя во всех квантовомеханических отношениях в частности, как гармонический осциллятор. Таким осциллятором считается динамическая система наподобие грузика на пружинке или стоячей волны в резонансной полости. Вот почему можно представлять электромагнитное поле фотонами частицами. С одной точки зрения можно анализировать электромагнитное поле в ящике или полости в терминах множества гармонических осцилляторов, рассматривая каждый тип колебаний, согласно квантовой механике, как гармонический осциллятор. С другой, отличной точки зрения ту же физику можно анализировать в терминах тождественных бозе-частиц. И итоги обоих способов рассуждений *всегда точно совпадают*. Невозможно установить, следует ли на самом деле электромагнитное поле описывать в виде квантуемого гармонического осциллятора или же задавать количество фотонов в каждом состоянии. Оба взгляда на вещи оказываются математически тождественными. В будущем мы сможем с равным правом говорить либо о числе фотонов в некотором состоянии в ящике, либо о номере уровня энергии, связанного с некоторым типом колебаний электромагнитного поля. Это два способа говорить об одном и том же. То же относится и к фотонам в пустом пространстве. Они эквивалентны колебаниям полости, стенки которой отошли на бесконечность.

Мы подсчитали среднюю энергию произвольного частного типа колебаний в ящике при температуре T ; чтобы получить закон излучения абсолютно черного тела, остается узнать только одно: сколько типов колебаний бывает при каждой энергии. (Мы предполагаем, что для каждого типа колебаний найдутся такие атомы в ящике — или в его стенках,— у которых есть уровни энергии, способные приводить к излучению этого типа колебаний, так что каждый тип может прийти в тепловое равновесие.) Закон излучения абсолютно черного тела обычно формулируют, указывая, сколько энергии в единице объема уносится

светом в малом интервале частот от ω до $\omega + \Delta\omega$. Так что нам нужно знать, сколько типов колебаний с частотой в интервале $\Delta\omega$ имеется в ящике. Хотя вопрос этот то и дело возникает в квантовой механике, это все же чисто классический вопрос, касающийся стоячих волн.

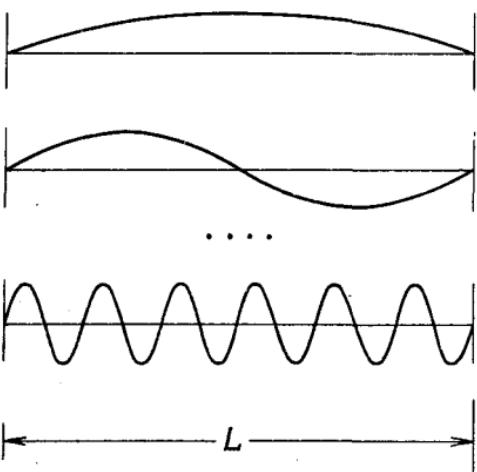
Ответ мы получим только для прямоугольного ящика. Для произвольного ящика выходит то же, только выкладки куда сложней. Нас еще будет интересовать ящик, размеры которого намного больше длины световых волн. В этом случае типов колебаний будет мириады и мириады; в каждом малом интервале частот $\Delta\omega$ их окажется очень много, так что можно будет говорить об их «среднем числе» в каждом интервале $\Delta\omega$ при частоте ω . Начнем с того, что спросим себя, сколько типов колебаний бывает в одномерном случае — у волн в натянутой струне. Вы знаете, что каждый тип колебаний — это синусоида, кривая, обращающаяся на обоих концах в нуль; иначе говоря, на всей длине линии (фиг. 2.8) должно укладываться целое число полуволн. Мы предпочтаем пользоваться волновым числом $k = 2\pi/\lambda$; обозначая волновое число j -го типа колебаний через k_j , получаем

$$k_j = \frac{j\pi}{L}, \quad (2.34)$$

где j — целое. Промежуток δk между последовательными типами равен

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

Нам удобно выбрать столь большое kL , что в малом интервале Δk оказывается множество типов колебаний.



Фиг. 2.8. Типы стоячих волн на отрезке.

Обозначив число типов колебаний в интервале Δk через $\Delta \mathfrak{N}$, имеем

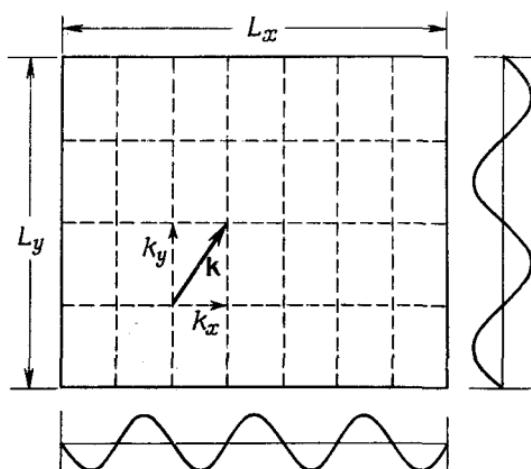
$$\Delta \mathfrak{N} = \frac{\Delta k}{\delta k} = \frac{L}{\pi} \Delta k. \quad (2.35)$$

Физики-теоретики, занимающиеся квантовой механикой, обычно предпочитают говорить, что типов колебаний вдвое меньше; они пишут

$$\Delta \mathfrak{N} = \frac{L}{2\pi} \Delta k. \quad (2.36)$$

И вот почему. Им обычно больше нравится мыслить на языке бегущих волн — идущих направо (с k положительными) и идущих налево (с k отрицательными). Но «тип колебаний», или «собственное колебание», — это *стоячая* волна, т. е. сумма двух волн, бегущих каждая в своем направлении. Иными словами, они считают, что каждая стоячая волна включает два различных фотонных «состояния». Поэтому если предпочтеть под $\Delta \mathfrak{N}$ подразумевать число фотонных состояний с данным k (где теперь уже k может быть и положительным, и отрицательным), то тогда $\Delta \mathfrak{N}$ окажется вдвое меньше. (Все интегралы теперь нужно будет брать от $k = -\infty$ до $k = +\infty$, и общее число состояний вплоть до любого заданного абсолютного значения k получится таким, как надо.) Конечно, стоячие волны мы тогда не сможем хорошо описывать, но подсчет типов колебаний будет идти согласованно.

Теперь наши результаты мы обобщим на три измерения. Стоячая волна в прямоугольном ящике должна обладать целым числом полуволн *вдоль каждой оси*. Случай двух измерений дан на фиг. 2.9. Каждое направление и частота волны описываются



Фиг. 2.9. Типы стоячих волн в двух измерениях.

вектором волнового числа \mathbf{k} . Его x -, y - и z -компоненты должны удовлетворять уравнениям типа (2.34). Стало быть, мы имеем

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

Число типов колебаний с k_x в интервале Δk_x , как и прежде, равно

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

то же и с Δk_y , и с Δk_z . Если обозначить через $\Delta \mathfrak{N}(\mathbf{k})$ число таких типов колебаний, в которых векторное волновое число \mathbf{k} обладает x -компонентой в интервале от k_x до $k_x + \Delta k_x$, y -компонентой в интервале от k_y до $k_y + \Delta k_y$ и z -компонентой в интервале от k_z до $k_z + \Delta k_z$, то

$$\Delta \mathfrak{N}(\mathbf{k}) = \frac{L_x L_y L_z}{(2\pi)^3} \Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z. \quad (2.37)$$

Произведение $L_x L_y L_z$ — это объем V ящика. Итак, мы пришли к важному результату, что для высоких частот (длин волн, меньших, чем габариты полости) число мод (типов колебаний) в полости пропорционально ее объему V и «объему в k -пространстве» $\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z$. Этот результат то и дело появляется то в одной, то в другой задаче, и его стоит запомнить:

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

Хоть мы этого и не доказали, результат не зависит от формы ящика.

Теперь мы применим этот результат для того, чтобы найти число фотонных мод для фотонов с частотами в интервале $\Delta \omega$. Нас интересует всего-навсего энергия разных собственных колебаний, а не направления самих волн. Мы хотим знать число собственных колебаний в данном интервале частот. В вакууме величина \mathbf{k} связана с частотой формулой

$$|\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c}. \quad (2.39)$$

Значит, в интервал частот $\Delta \omega$ попадают все моды, отвечающие векторам \mathbf{k} , величина которых меняется от k до $k + \Delta k$ независимо от направления. «Объем в k -пространстве» между k и $k + \Delta k$ — это сферический слой, объем которого равен

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

Количество собственных колебаний (мод) тогда равно

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

Однако раз нас интересуют частоты, то надо подставить $k = \omega/c$, и мы получаем

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

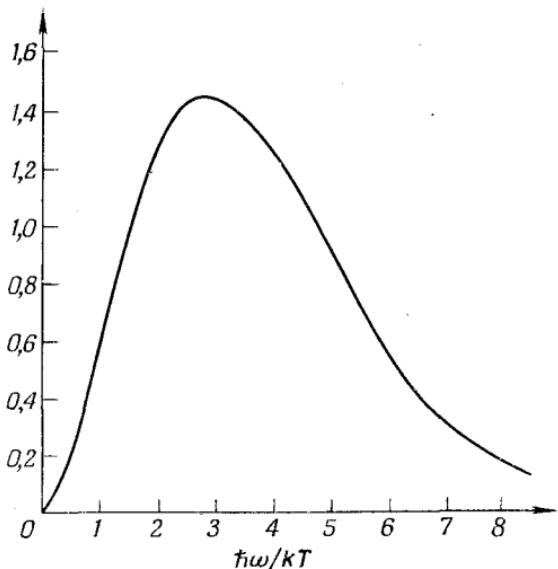
Но здесь возникает одно усложнение. Если мы говорим о собственных колебаниях электромагнитной волны, то каждому данному волновому вектору \mathbf{k} может соответствовать любая из двух поляризаций (перпендикулярных друг другу). Поскольку эти собственные колебания независимы, то нужно (для света) удвоить их число. И мы имеем

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

Мы показали уже [см. (2.33)], что каждое собственное колебание (мода, тип колебаний, «состояние») обладает в среднем энергией

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

Умножая это на число собственных колебаний, мы получаем энергию ΔE , которой обладают собственные колебания,



Фиг. 2.10. Спектр частот излучения в полости при тепловом равновесии (спектр «абсолютно черного тела»).

На оси ординат отложена величина $x^3/e^x - 1$ ($x = \hbar\omega/kT$). Отличающаяся от $dE/d\omega$ постоянным множителем $(\pi\hbar)^2 (c, kT)^3 V^{-1}$.

лежащие в интервале $\Delta\omega$:

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

Это и есть закон для спектра частот излучения абсолютно черного тела, найденный нами уже однажды в гл. 41 (вып. 4). Спектр этот вычерчен на фиг. 2.10. Вы теперь видите, что ответ зависит от того факта, что фотоны являются бозе-частицами — частицами, имеющими тенденцию собираться всем вместе в одном и том же состоянии (амплитуда такого поведения велика). Вы помните, что именно Планк, изучавший спектр абсолютно черного тела (который представлял загадку для классической физики) и открывший формулу (2.43), положил тем самым начало квантовой механике.

§ 6. Жидкий гелий

Жидкий гелий при низких температурах обладает рядом странных свойств, на подробное описание которых у нас, к сожалению, не хватает времени. Многие из них просто связаны с тем, что атом гелия — это бозе-частица. Одно из этих свойств — жидкость гелий течет без какого бы то ни было вязкого сопротивления. Это в действительности та самая «сухая» вода, о которой мы говорили в одной из прежних глав (при условии, что скорости достаточно низки). Причина здесь вот в чем. Чтобы жидкость обладала вязкостью, в ней должны быть внутренние потери энергии; надо, чтобы одна из частей жидкости могла двигаться не так, как оставшаяся жидкость. Это означает, что должна быть возможность выбивать некоторые атомы в состояния, отличные от тех, в которых пребывают другие атомы. Но при достаточно низких температурах, когда тепловое движение становится очень слабым, все атомы стремятся попасть в одно и те же условия. Так, если некоторые из них движутся в одну сторону, то и все атомы пытаются двигаться все вместе таким же образом. Это своего рода жесткость по отношению к движению, и такое движение трудно разбить на неправильные турбулентные части, как это было бы, скажем, с независимыми частицами. Итак, в жидкости бозе-частиц есть сильное стремление к тому, чтобы все атомы перешли в одно состояние, — стремление, представляемое множителем $\sqrt{n+1}$, полученным нами ранее. (А в быту гелия n , конечно, очень большое число!) Это движение не происходит при высоких температурах, потому что тогда тепловой энергии хватает на то, чтобы перевести разные атомы во всевозможные различные высшие состояния. Но при достаточном понижении температуры внезапно наступает момент, когда все атомы гелия стремятся оказаться в одном и том же состоянии. Гелий становится сверхтекучим. Кстати,

это явление возникает лишь у изотопа гелия с атомным весом 4. Отдельные атомы изотопа гелия с атомным весом 3 суть ферми-частицы, и жидкость здесь самая обычная. Поскольку сверхтекучесть бывает лишь у He^4 , то со всей очевидностью этот эффект квантовомеханический, вызываемый бозевской природой α -частицы.

§ 7. Принцип запрета

Ферми-частицы ведут себя совершенно иначе. Посмотрим, что произойдет, если мы попытаемся поместить две ферми-частицы в одно и то же состояние. Вернемся к нашему первоначальному примеру и поинтересуемся амплитудой того, что две идентичные ферми-частицы рассеются в почти одинаковом направлении. Амплитуда того, что частица a пойдет в направлении 1, а частица b — в направлении 2, есть

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

тогда как амплитуда того, что направления вылетающих частиц обменяются местами, такова:

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

Раз мы имеем дело с ферми-частицами, то амплитуда процесса является разностью этих двух амплитуд:

$$\langle 1 | a \rangle \langle 2 | b \rangle - \langle 2 | a \rangle \langle 1 | b \rangle. \quad (2.44)$$

Следует сказать, что под «направлением 1» мы подразумеваем, что частица обладает не только определенным направлением, но и заданным направлением своего спина, а «направление 2» почти совпадает с направлением 1 и отвечает *тому же* направлению спина. Тогда $\langle 1 | a \rangle$ и $\langle 2 | a \rangle$ будут примерно равны. (Этого могло бы и не быть, если бы состояния 1 и 2 вылетающих частиц не обладали одинаковым спином, потому что тогда по каким-то причинам могло бы оказаться, что амплитуда зависит от направления спина.) Если теперь позволить направлениям 1 и 2 сблизиться друг с другом, то полная амплитуда в уравнении (2.44) станет равной нулю. Для ферми-частиц результат много проще, чем для бозе-частиц. Просто абсолютно невозможно, чтобы две ферми-частицы, например два электрона, оказались в одинаковом состоянии. Вы никогда не обнаружите два электрона в одинаковом положении и со спинами, направленными в одну сторону. Двум электронам невозможно иметь один и тот же импульс и одно и то же направление спина. Если они оказываются в одном и том же месте или в одном и том же состоянии движения, то единственное, что им остается, — это завернуться навстречу друг другу.



Фиг. 2.11. Так могли бы выглядеть атомы, если бы электроны вели себя как бозе-частицы.

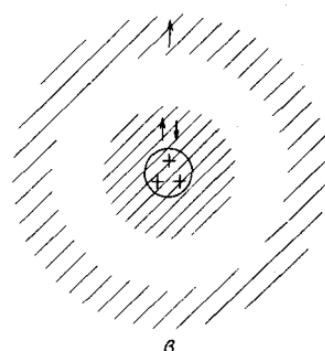
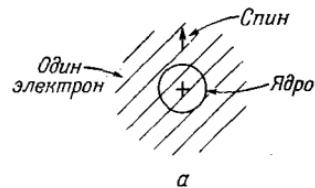
Каковы следствия этого? Имеется множество замечательных эффектов, происходящих из того факта, что две ферми-частицы не могут попасть в одно и то же состояние. На самом деле почти все особенности материального мира зависят от этого изумительного факта. Все разнообразие, представленное в периодической таблице элементов, в основе своей является следствием только этого правила.

Конечно, мы не можем сказать, на что был бы похож мир, если бы это правило — и только оно одно — изменилось; ведь оно является частью всей структуры квантовой механики, и невозможно сказать, что бы еще изменилось, если бы правило, касающееся ферми-частиц, стало бы другим. Но все же попробуем представить себе, что случилось бы, если бы переменилось только это правило. Во-первых, можно показать, что каждый атом остался бы более или менее неизменным. Начнем с атома водорода. Он заметно не изменился бы. Протон ядра был бы окружен сферически симметричным электронным облаком (фиг. 2.11, а). Как мы уже писали в гл. 38 (вып. 3), хоть электрон и притягивается к центру, принцип неопределенности требует, чтобы было равновесие между концентрацией в пространстве и концентрацией по импульсу. Равновесие означает, что распределение электронов должно характеризоваться определенной энергией и протяженностью, определяющими характеристические размеры атома водорода.

Пусть теперь имеется ядро с двумя единицами заряда, например ядро гелия. Это ядро будет притягивать два электрона, и, будь они бозе-частицами, они бы, если не считать их электрического отталкивания, сплотились близ ядра как можно тесней. Атом гелия выглядел бы так, как на фиг. 2.11, б. Точно так же и атом лития, у которого ядро заряжено трехкратно, обладал бы электронным распределением, похожим на то, что изображено на фиг. 2.11, в. Каждый атом выглядел бы более или менее, как раньше: круглый шарик, все электроны в котором сидят близ ядра; не было бы никаких выделенных направлений и никаких сложностей.

Но из-за того, что электроны — это ферми-частицы, действительное положение вещей совершенно иное. Для атома во-

Фиг. 2.12. Атомные конфигурации для настоящих, фермиевского типа электронов со спином $\frac{1}{2}$.



дореда оно в общем-то не меняется. Единственное отличие в том, что у электрона есть спин (показан на фиг. 2.12, а стрелкой). В случае же атома гелия мы уже не сможем посадить один из электронов на другой. Впрочем, погодите, это верно лишь тогда, когда их спины направлены одинаково. Но если они разведут свои спины врозь, то они уже *будут вправе* занять одно и то же место. Так что атом гелия тоже не очень-то изменится. Он будет выглядеть так, как показано на фиг. 2.12, б. А вот для лития положение вещей совершенно изменится. Куда сможем мы пристроить третий электрон? Его нельзя посадить прямо на первые два, потому что оба направления спина заняты. (Вы помните, что и у электрона, и у любой частицы со спином $\frac{1}{2}$ имеются лишь два допустимых направления спина.) Третий электрон не сможет приблизиться к месту, оккупированному двумя другими, он обязан занять особое положение в каком-то ином состоянии, намного дальше от ядра (фиг. 2.12, в). (Мы здесь говорим обо всем довольно грубо, потому что на самом деле все три электрона тождественны, а раз мы не можем в действительности разобраться, кто из них кто, то наш рисунок верен только в общих чертах.)

Теперь мы уже начинаем понимать, отчего у разных атомов бывают разные химические свойства. Из-за того, что третий электрон в литии намного дальше, он связан несравненно слабее. Увести один электрон у лития куда легче, чем у гелия. (Опыт говорит, что для ионизации гелия нужно 25 в, а для ионизации лития лишь 5 в.) Это отражается на валентности атома лития. Свойства валентности, касающиеся направлений, связанны с волновой картиной внешнего электрона, но мы не будем

сейчас входить в подробности. Становится понятной важность так называемого *принципа запрета*, утверждающего, что никакие два электрона не могут оказаться в точности в одном и том же состоянии (включая спин).

Принцип запрета несет также ответственность за крупномасштабную стабильность вещества. Мы раньше уже объясняли, что отдельные атомы вещества не обваливаются благодаря принципу неопределенности, тогда можно понять, почему не бывает так, чтобы два атома водорода прижались друг к другу сколь угодно тесно, почему все протоны не могут сойтись вплотную, образовав вокруг себя электронную тучу. Ответ, конечно, состоит в том, что поскольку в одном месте может находиться не более двух электронов с противоположными спинами, то атомы водорода вынуждены держаться поодаль друг от друга. Так что крупномасштабная стабильность вещества на самом деле есть следствие того, что электроны — это ферми-частицы.

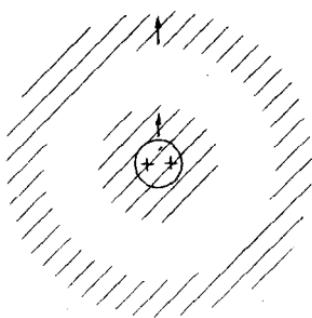
Конечно, если у двух атомов спины внешних электронов направлены в противоположные стороны, то они могут оказаться вплотную друг к другу. Именно так и возникает химическая связь. Оказывается, что два рядом стоящих атома обладают меньшей энергией, если между ними стоит электрон. Это своего рода электрическое притяжение двух положительных ядер к электрону между ними. Можно поместить пару электронов — коль скоро их спины противоположны — примерно посередине между двумя ядрами, и так возникает самая сильная из химических связей. Более сильной связи не бывает, потому что принцип запрета не позволяет, чтобы в пространстве между атомами оказалось больше двух электронов. Считается, что молекула водорода выглядит примерно так, как изображено на фиг. 2.13.

Хочется сказать еще об одном следствии из принципа запрета. Вы помните, что если оба электрона в атоме гелия хотят оказаться поближе к ядру, то их спины обязательно должны смотреть навстречу друг другу. Допустим теперь, что нам бы захотелось расположить поблизости друг от друга два электрона с одним и тем же спином, скажем, приложив столь фантастически сильное магнитное поле, что спины выстроились бы в одну сторону. Но тогда два электрона не смогут занять одного положения в пространстве. Один из них вынужден будет занять другую геометрическую позицию (фиг. 2.14). Более удаленный

Фиг. 2.13. Молекула водорода.



Фиг. 2.14. Гелий с одним электроном в высшем энергетическом состоянии.

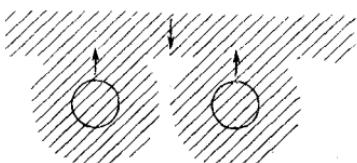


от ядра электрон будет обладать меньшей энергией связи. Поэтому энергия всего атома станет чуть выше. Иными словами, если два спина противоположны, то это приводит к намного более сильному взаимному притяжению.

Стало быть, существует взаимодействие, стремящееся расположить спины навстречу друг другу, когда электроны сближаются. Если два электрона пытаются попасть в одно и то же место, то спины стремятся выстроиться навстречу друг другу. Эта кажущаяся сила, стремящаяся ориентировать спины в разные стороны, намного мощнее слабеньких сил, действующих между магнитными моментами двух электронов. Вы помните, что, когда мы толковали о ферромагнетизме, возникала загадка, отчего это электроны в разных атомах имеют столь сильную тенденцию выстраиваться параллельно. Хотя здесь еще нет количественного объяснения, но уже можно поверить в следующий процесс: электроны, окружающие один из атомов, взаимодействуют при помощи принципа запрета с внешними электронами, которые высвободились и бродят по кристаллу. Это взаимодействие заставляет спины свободных электронов и внутренних электронов принимать противоположные направления. Но свободные электроны и внутриатомные электроны могут выстроиться противоположно лишь при условии, что у всех внутренних электронов спины направлены одинаково (фиг. 2.15). Кажется весьма вероятным, что именно влияние принципа запрета, действующего косвенно через свободные электроны, кладет начало большим выстраивающим силам, ответственным за ферромагнетизм.

Фиг. 2.15. Вероятный механизм, действующий в ферромагнитном кристалле.

Спины электронов проводимости устанавливаются антипараллельно спинам неспаренных внутренних электронов.



Упомянем еще один пример влияния принципа запрета. Мы уже говорили ранее, что ядерные силы, действующие между нейтроном и протоном, между протоном и протоном и между нейтроном и нейтроном, одинаковы. Почему же так получается, что протон с нейтроном могут пристать друг к другу, образовав ядро дейтерия, а вот ядер просто с двумя протонами или просто с двумя нейтронами не существует? Действительно, дейtron связан энергией около 2,2 Мэв, а соответствующей связи между парой протонов, которая бы создала изотоп гелия с атомным весом 2, не существует. Таких ядер не бывает. Комбинация двух протонов не дает связанного состояния.

Ответ складывается из двух эффектов: во-первых, из принципа запрета; во-вторых, из того факта, что ядерные силы довольно чувствительны к направлению спина. Силы, действующие между нейтроном и протоном, — это силы притяжения; они чуть больше, когда спины параллельны, и чуть меньше, когда они направлены противоположно. Оказывается, что различие между этими силами достаточно велико, чтобы дейtron возникал лишь в том случае, когда спины нейтрона и протона параллельны, а когда спины противоположны, то притяжения не хватает на то, чтобы связать частицы воедино. Поскольку спины нейтрона и протона каждый равен $\frac{1}{2}$ и направлены они в одну сторону, то спин дейтрана равен единице. Мы знаем, однако, что двум протонам не разрешается сидеть друг на друге, если их спины параллельны. Если бы не было принципа запрета, два протона были бы связаны. Но раз они не могут существовать в одном месте и с одним и тем же направлением спина, ядра He^2 не существует. Протоны с противоположными спинами могли бы сойтись, но тогда им не хватило бы энергии связи для образования стабильного ядра, потому что ядерные силы при противоположных спинах чересчур слабы, чтобы связать пару нуклонов. В том, что силы притяжения между нейтронами и протонами с противоположными спинами существуют, можно убедиться из опытов по рассеянию. Сходные же опыты по рассеянию двух протонов с параллельными спинами показывают, что и между ними существует притяжение. Итак, принцип запрета помогает нам понять, почему дейтерий может существовать, а He^2 нет.

Глава 3

СПИН ЕДИНИЦА

§ 1. Фильтровка атомов при помощи прибора Штерна — Герлаха

§ 2. Опыты с профильтрованными атомами

§ 3. Последовательно соединенные фильтры Штерна — Герлаха

§ 4. Базисные состояния

§ 5. Интерферирующие амплитуды

§ 6. Механика квантовой механики

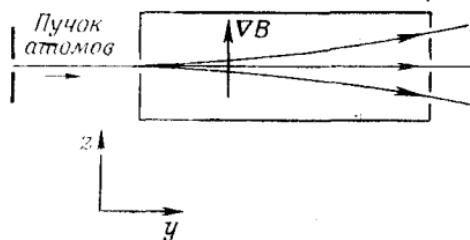
§ 7. Преобразование к другому базису

§ 8. Другие случаи

Повторить: гл. 35
(вып. 7) «Парамагнетизм и магнитный резонанс»

В этой главе мы начнем изучать квантовую механику по-настоящему — в том смысле, что мы собираемся теперь описывать квантовомеханическое явление полностью с квантовомеханической точки зрения. Мы не будем искать объяснений в классической механике или пытаться установить с ней связь. Мы хотим говорить на новом языке о чем-то новом. Частный случай, с которого мы начнем, это поведение квантованного момента количества движения для частицы со спином 1. Но мы не хотим употреблять такие слова, как «момент количества движения» или другие понятия классической механики, мы несколько отложим их обсуждение. Мы избрали этот частный случай лишь потому, что он достаточно прост, хотя и не самый простой из всех. Он достаточно сложен для того, чтобы служить образцом, который можно будет обобщить для описания всех квантовомеханических явлений. Стало быть, хотя мы будем иметь дело лишь с частным примером, все законы, которые мы упомянем, могут быть немедленно обобщены; мы так и сделаем, чтобы вам стали ясны общие черты квантовомеханического описания.

Начнем с явления расщепления пучка атомов на три отдельных пучка в опыте Штерна — Герлаха. Вы помните, что если имеется неоднородное магнитное поле, созданное магнитом с острым полюсным наконечником, и если через прибор пропустить пучок частиц, то этот пучок может расщепиться на несколько пучков; их количество зависит от сорта атома и его состояния. Мы разберем случай, когда атом расщепляется на три пучка; такую частицу



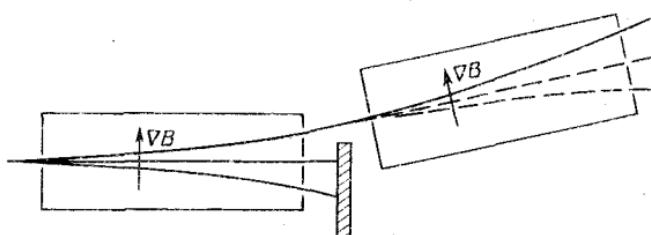
Фиг. 3.1. В опыте Штерна—Герлаха атомы со спином 1 расщепляются на три пучка.

мы будем называть частицей со спином 1. Вы сможете потом сами разобрать случай пяти пучков, семи пучков, двух и т. д. Вам придется попросту все скопировать, но там, где у нас были три члена, у вас окажется пять, семь, два и т. д.

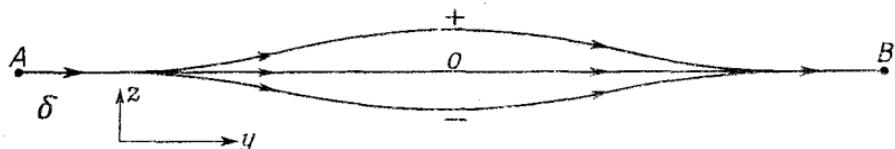
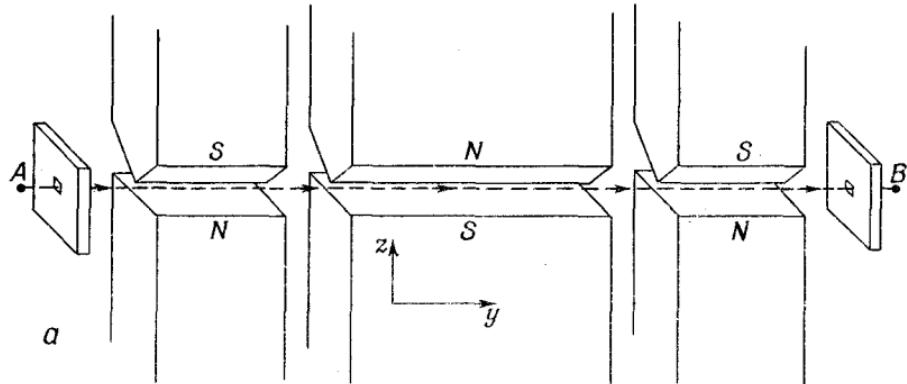
Представьте себе прибор, схематически начертенный на фиг. 3.1. Пучок атомов (или любых частиц) коллимирован (ограничен) какими-то прорезями и проходит сквозь неоднородное поле. Пусть пучок движется по оси y , а магнитное поле и его градиент направлены по оси z . Тогда, глядя со стороны, мы увидим, как пучок расщепляется по вертикали на три пучка. На выходном конце магнита можно поставить небольшие счетчики, подсчитывающие скорость появления частиц в том или ином из трех пучков. Или можно перекрыть два пучка и пропускать только третий.

Предположим, что мы перекрыли два нижних пучка, а самый верхний пропустили, введя его во второй прибор Штерна — Герлаха такого же типа (фиг. 3.2). Что произойдет? Во втором приборе уже *не будет* трех пучков; там останется только верхний пучок (мы предполагаем, что угол отклонения очень мал). Если считать второй прибор простым продолжением первого, то те атомы, которые в первый раз отклонялись вверх, продолжают отклоняться вверх и вторым магнитом.

Вы видите, что первый прибор создал пучок «очищенных» объектов — атомов, которые отклонились вверх в некотором неоднородном поле. Те атомы, которые входят в первоначальный прибор Штерна — Герлаха, суть атомы трех «разновидностей», и эти три сорта выбирают разные траектории. Отфильтровывая одну-единственную разновидность, можно создать такой



Фиг. 3.2. Атомы одного из пучков посланы в другой такой же прибор.



Фиг. 3.3. Воображаемое видоизменение прибора Штерна — Герлаха (а) и пути атомов со спином 1 (б).

пучок, будущее поведение которого в приборе того же типа вполне определено и предсказуемо. Такой пучок мы назовем *отфильтрованным*, или *поляризованным*: в этом пучке все атомы находятся в *определенном состоянии*.

В дальнейшем будет удобнее рассматривать слегка видоизмененный прибор Штерна — Герлаха. На первый взгляд он выглядит сложнее, но на самом деле упрощает все рассуждения. Впрочем, раз мы будем делать только «мысленные эксперименты», усложнение оборудования не будет стоить нам ни гроша. (Заметим, кстати, что никто никогда всех этих экспериментов точно таким образом не ставил, а мы тем не менее знаем, что в них произойдет. Мы это знаем из законов квантовой механики, которые, конечно, основаны на других сходных экспериментах. Эти другие эксперименты вначале труднее понять, и мы предпочтаем описывать какие-то идеализированные, но мыслимые эксперименты.)

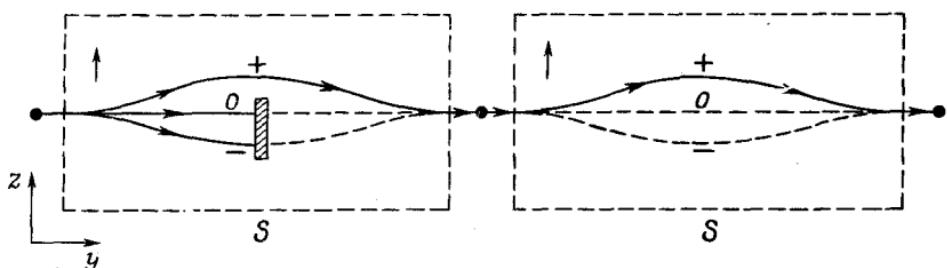
На фиг. 3.3, а изображен чертеж «усовершенствованного» прибора Штерна — Герлаха, которым мы и будем пользоваться. Он состоит из последовательности трех магнитов с сильным градиентом поля. Первый (левый) — это обычный магнит Штерна — Герлаха. Он разделяет падающий пучок частиц со спином 1 на три отдельных пучка. Второй магнит имеет то же сечение, что и первый, но он вдвое длиннее и полярность его

магнитного поля противоположна полю в первом магните. Второй магнит отталкивает атомные магнитики в обратную сторону и искривляет их пути снова к оси, как показано на траекториях, начертенных на фиг. 3.3, б. Третий магнит в точности похож на первый; он сводит три пучка снова в одно место и выпускает их через выходное отверстие вдоль оси. Наконец, надо представить себе, что перед отверстием в A имеется какой-то механизм, который разгоняет атомы из состояния покоя, а после выходного отверстия в B имеется замедляющий механизм, который опять приводит атомы в B в состояние покоя. Это несущественно, но это все же будет означать, что в нашем анализе нам не придется заботиться об учете каких-либо эффектов движения, когда атомы выходят, и можно будет сосредоточиться на тех вопросах, которые связаны только со спином.

Все назначение «усовершенствованного» прибора в том и состоит, чтобы свести все частицы в одно и то же место, где они имели бы нулевую скорость.

Если мы хотим теперь провести опыт наподобие показанного на фиг. 3.2, то для начала нужно будет получить отфильтрованный пучок, вставив внутрь прибора пластинку, которая загородит два пучка (фиг. 3.4). Если теперь пропустить полученные поляризованные атомы через второй такой же прибор, то все атомы изберут верхний путь; в этом можно убедиться, поставив такие же пластинки на пути различных пучков во втором фильтре и наблюдая, пройдут ли частицы насеквость.

Обозначим первый прибор буквой S . (Мы собираемся рассматривать всевозможные сочетания приборов, и, чтобы не путаться, мы дадим каждому свое имя.) Об атомах, которые избрали в S верхний путь, мы скажем, что они находятся в «плюс-состоянии по отношению к S "; о тех, которые пошли по среднему пути, — что они «в нуль-состоянии по отношению к S », и о тех, которые выбрали нижний путь, — что они в «минус-состоянии по отношению к S ». (На более привычном языке мы бы сказали,



Фиг. 3.4. «Усовершенствованный» прибор Штерна—Герлаха в качестве фильтра.

что z -компоненты момента количества движения равны $+1\hbar$, 0 и $-1\hbar$, но сейчас мы отказались от этого языка.) На фиг. 3.4 второй прибор ориентирован точно так же, как первый, так что отфильтрованные атомы все пойдут по верхнему пути. А если бы в первом приборе загородить верхний и нижний пучки и пропустить только находящиеся в нуль-состоянии, то все отфильтрованные атомы прошли бы через среднюю часть второго прибора. И наконец, если бы загородить в первом приборе все пучки, кроме нижнего, то во втором был бы только нижний пучок. Можно сказать, что в любом случае первый прибор создает отфильтрованный пучок в чистом состоянии по отношению к S ($+$, 0 или $-$), и мы всегда можем испытать, какое именно состояние он создает, пропустив атомы через второй такой же прибор.

Можно и второй прибор устроить так, чтобы он пропускал атомы только в одном определенном состоянии. Для этого нужно поставить внутри него перегородки так, как мы это делали в первом приборе, и тогда можно будет проверять состояние падающего пучка, просто глядя, вышло ли что-нибудь из дальнего конца. Например, если загородить два нижних пути во втором приборе, то все атомы выйдут наружу; если же загородить верхний, то не пройдет ничего.

Чтобы облегчить подобные рассуждения, мы сейчас будем сокращенное изображение наших усовершенствованных приборов Штерна — Герлаха. Вместо каждого такого прибора мы будем ставить символ

$$\left. \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}. \quad (3.1)$$

(Этот символ вы не встретите в квантовой механике; мы попросту выдумали его для этой главы. Он означает просто сокращенное изображение прибора, показанного на фиг. 3.3.) Поскольку мы собираемся пользоваться несколькими приборами одновременно, имеющими к тому же разную ориентацию, то каждый из них мы будем отмечать буквой внизу. Так, символ (3.1) обозначает прибор S . Загораживая внутри один или больше пучков, мы будем отмечать это вертикальными чертами, показывающими, какой из пучков перекрыт, наподобие

$$\left. \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \\ | \end{array} \right\}. \quad (3.2)$$

Различные мыслимые комбинации собраны на фиг. 3.5.

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} = \text{Diagram } a$$

Фиг. 3.5. Специальные сокращенные обозначения для фильтров типа Штерна — Герлаха.

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} = \text{Diagram } \delta$$

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} = \text{Diagram } \beta$$

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} = \text{Diagram } \gamma$$

Если два фильтра стоят друг за другом (как на фиг. 3.4), мы и символы будем ставить друг за другом:

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_S \quad \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_S \quad (3.3)$$

При таком расположении все, что прошло через первый фильтр, пройдет и через второй. В самом деле, даже если мы перекроем каналы «нуль» и «минус» второго прибора, так что будет

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_S \quad \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_S, \quad (3.4)$$

все равно прохождение через второй прибор будет 100%-ным. Но если имеется

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_S \quad \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_S, \quad (3.5)$$

то из дальнего конца не выйдет ничего. Равным образом ничего не выйдет и при

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_S \quad \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_S. \quad (3.6)$$

С другой стороны,

$$\begin{array}{cc} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \\ S \end{array} \right\} & \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \\ S \end{array} \right\} \end{array} \quad (3.7)$$

было бы просто эквивалентно одному только

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \\ S \end{array} \right\}.$$

Теперь мы хотим описать эти опыты квантовомеханически. Мы скажем, что атом находится в состоянии $(+S)$, если он прошел через прибор, изображенный на фиг. 3.5, б, что он находится в состоянии $(0S)$, если прошел сквозь прибор на фиг. 3.5, в, и что он находится в состоянии $(-S)$, если прошел сквозь прибор на фиг. 3.5, г *. Затем пусть $\langle b | a \rangle$ будет амплитуда того, что атом, который находится в состоянии a , пройдя через прибор, окажется в состоянии b . Можно сказать $\langle b | a \rangle$ есть амплитуда для атома в состоянии a *перейти* в состояние b . Опыт (3.4) означает, что

$$\langle +S | +S \rangle = 1,$$

а (3.5) — что

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

Точно так же и результат (3.6) означает, что

$$\langle +S | -S \rangle = 0,$$

а (3.7) — что

$$\langle -S | -S \rangle = 1.$$

Пока мы имеем дело только с «чистыми» состояниями, т. е. пока бывает открыт только один канал, таких амплитуд всего девять. Их можно перечислить в следующей таблице:

B \ Из	+S	0S	-S
+S	1	0	0
0S	0	1	0
-S	0	0	1

* Произносить надо так: $(+S)$ — «плюс- S »; $(0S)$ — «нуль- S »; $(-S)$ — «минус- S ».

Эта совокупность девяти чисел, именуемая *матрицей*, по-
дытоживает описанные нами явления.

§ 2. Опыты с профильтрованными атомами

Теперь возникает важный вопрос: что будет, если второй прибор наклонить под некоторым углом, так чтобы ось его поля больше не была параллельной оси первого? Его можно не только наклонить, но и направить в другую сторону, например повернуть пучок поперек. Вначале для простоты возьмем такое расположение, при котором второй прибор Штерна — Герлаха повернут вокруг оси y на угол α (фиг. 3.6). Такой прибор мы обозначим буквой T . Пусть мы теперь предприняли следующий опыт:

$$\begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \\ S \end{array} \quad \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \\ T \end{array}$$

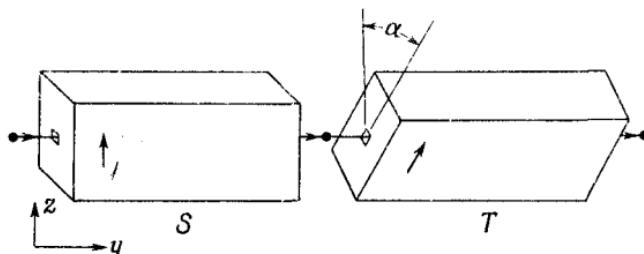
или такой опыт:

$$\begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \\ S \end{array} \quad \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \\ T \end{array}$$

Что в этих случаях выйдет из дальнего конца?

Ответ таков. Если атомы по отношению к S находятся в определенном состоянии, то по отношению к T они *не находятся* в том же состоянии, состояние $(+S)$ *не является* также и состоянием $(+T)$. Однако *имеется* определенная амплитуда обнаружить атом в состоянии $(+T)$, или в состоянии $(0 T)$, или в состоянии $(-T)$.

Иными словами, как бы досконально мы ни убедились, что наши атомы находятся в определенном состоянии, факт ос-



Фиг. 3.6. Два последовательно соединенных фильтра типа Штерна — Герлахи.

Второй повернут относительно первого на угол α .

тается фактом, что, когда такой атом проходит через прибор, наклоненный под другим углом, он вынужден, так сказать, «переориентироваться» (что происходит, не забывайте, по законам случая). Если пропускать в каждый момент по одной частице, то вопрос можно будет ставить только таким образом: какова вероятность того, что она пройдет насквозь? Некоторые прошедшие сквозь S атомы очутятся в конце в состоянии $(+T)$, другие — в состоянии $(0T)$, трети — в состоянии $(-T)$, и каждому состоянию отвечает своя вероятность. Эти вероятности можно вычислить, зная квадраты модулей комплексных амплитуд; нам нужен математический метод для этих амплитуд, их квантовомеханическое описание. Нам нужно знать, чему равны различные величины типа

$$\langle -T | +S \rangle;$$

под этими выражениями мы подразумеваем амплитуду того, что атом, первоначально бывший в состоянии $(+S)$, может перейти в состояние $(-T)$ (что *не равно* нулю, если только S и T не параллельны друг другу). Имеются и другие амплитуды, например

$$\langle +T | 0S \rangle \quad \text{или} \quad \langle 0T | -S \rangle \quad \text{и т. д.}$$

Таких амплитуд на самом деле девять — это тоже матрица, и теория должна сообщить нам, как их вычислять. Подобно тому как $F = ma$ сообщает нам, как подсчитать, что бывает в любых обстоятельствах с классической частицей, точно так же и законы квантовой механики позволяют нам определять амплитуду того, что частица пройдет через такой-то прибор. Центральный вопрос тогда заключается в том, как сосчитать для каждого данного угла α или вообще для какой угодно ориентации девять амплитуд:

$$\begin{aligned} &\langle +T | +S \rangle, \quad \langle +T | 0S \rangle, \quad \langle +T | -S \rangle, \\ &\langle 0T | +S \rangle, \quad \langle 0T | 0S \rangle, \quad \langle 0T | -S \rangle, \\ &\langle -T | +S \rangle, \quad \langle -T | 0S \rangle, \quad \langle -T | -S \rangle. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Некоторые соотношения между этими амплитудами мы сразу можем себе представить. Во-первых, согласно нашим определениям, квадрат модуля

$$|\langle +T | +S \rangle|^2$$

— это *вероятность* того, что атом, бывший в состоянии $(+S)$, придет в состояние $(+T)$. Такие квадраты удобнее писать в эквивалентном виде

$$\langle +T | +S \rangle \langle +T | +S \rangle^*.$$

В тех же обозначениях число

$$\langle 0T | +S \rangle \langle 0T | +S \rangle^*$$

дает вероятность того, что частица в состоянии $(+S)$ перейдет в состояние $(0T)$, а

$$\langle -T | +S \rangle \langle -T | +S \rangle^*$$

— вероятность того, что она перейдет в состояние $(-T)$. Но наши приборы устроены так, что каждый атом, входящий в прибор T , должен быть найден в *каком-то* одном из трех состояний прибора T , — атомам данного сорта нет других путей. Стало быть, сумма трех только что написанных вероятностей должна равняться единице. Получается соотношение

$$\langle +T | +S \rangle \langle +T | +S \rangle^* + \langle 0T | +S \rangle \langle 0T | +S \rangle^* + \langle -T | +S \rangle \langle -T | +S \rangle^* = 1. \quad (3.10)$$

Имеются, конечно, еще два таких же уравнения для случаев, когда вначале было состояние $(0S)$ или $(-S)$. Их очень легко написать, так что мы переходим к другим общим вопросам.

§ 3. Последовательно соединенные фильтры Штерна — Герлаха

Пусть у нас есть атомы, отфильтрованные в состояние $(+S)$, которые мы затем пропустили через второй фильтр, переведя, скажем, в состояние $(0T)$, а *затем* — через *другой* фильтр $(+S')$. (Обозначим его S' , чтобы не путать с первым фильтром S .) Вспомнят ли атомы, что они уже раз были в состоянии $(+S)$? Иначе говоря, мы ставим такой опыт:

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \\ S \end{array} \right\} \quad \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \\ T \end{array} \right\} \quad \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \\ S' \end{array} \right\} \quad (3.11)$$

и хотим знать, все ли атомы, прошедшие сквозь T , пройдут и сквозь S' . *Нет*. Как только они пройдут фильтр T , они сразу же *погубят* о том, что, входя в T , они были в состоянии $(+S)$. Заметьте, что второй прибор S в (3.11) ориентирован в точности так же, как первый, так что это по-прежнему фильтр типа S . Состояния, выделяемые фильтром S' , — это, конечно, все те же $(+S)$, $(0S)$ и $(-S)$.

Здесь существенно вот что: *если фильтр T пропускает только один пучок*, то та доля пучка, которая проходит через второй фильтр S , зависит только от расположения фильтра T и совершенно не зависит от того, что было перед ним. Тот факт, что те же самые атомы однажды уже были отсортированы фильтром S , никак и ни в чем не влияет на то, что они будут делать после того, как прибор T снова отсортирует их в чистый пучок. Отсюда следует, что вероятность перейти в те или иные состояния

для них одна и та же безотносительно к тому, что с ними случалось до того, как они угодили в прибор T .

Для примера сравним опыт (3.11) с опытом

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ + \end{array} \right\}_S \quad \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_T \quad \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_{S'}, \quad (3.12)$$

в котором изменилось только первое S . Пусть, скажем, угол α (между S и T) таков, что в опыте (3.11) треть атомов, прошедших сквозь T , прошла также и через S' . В опыте (3.12), хоть в нем, вообще говоря, через T пройдет другое число атомов, но через S' пройдет *та же самая часть их* — одна треть.

Мы можем на самом деле показать, опираясь на то, чему мы научились раньше, что доля атомов, которые выходят из T и проходят через произвольный определенный фильтр S' , зависит лишь от T и S' , а не от чего бы то ни было происходившего ранее. Сравним опыт (3.12) с

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_S \quad \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_T \quad \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}_{S'}. \quad (3.13)$$

Амплитуда того, что атом, выходящий из S , пройдет и сквозь T , и сквозь S' , в опыте (3.12) равна

$$\langle +S | 0T \rangle \langle 0T | 0S \rangle.$$

Соответствующая вероятность такова:

$$|\langle +S | 0T \rangle \langle 0T | 0S \rangle|^2 = |\langle +S | 0T \rangle|^2 |\langle 0T | 0S \rangle|^2,$$

а вероятность в опыте (3.13)

$$|\langle 0S | 0T \rangle \langle 0T | 0S \rangle|^2 = |\langle 0S | 0T \rangle|^2 |\langle 0T | 0S \rangle|^2.$$

Их отношение

$$\frac{|\langle 0S | 0T \rangle|^2}{|\langle +S | 0T \rangle|^2}$$

зависит только от T и S' и совсем не зависит от того, какой пучок $(+S)$, $(0S)$ или $(-S)$ был отобран в S . (Абсолютные же количества могут быть большими или меньшими, смотря по тому, сколько прошло через T .) Мы бы получили, конечно, аналогичный результат, если бы сравнили вероятности того, что атомы перейдут в плюс- или минус-состояние (по отношению к S'), или отношения вероятностей перейти в нуль- или минус-состояние.

Но раз эти отношения зависят только от того, какой пучок может пройти сквозь T , а не от отбора, выполненного первым фильтром S , то становится ясно, что тот же результат получился бы, если бы последний прибор даже не был фильтром S . Если в качестве третьего прибора (назовем его R) мы используем прибор, повернутый относительно T на некоторый произвольный угол, то все равно увидим, что отношения типа

$$\frac{|\langle 0 | R | 0 T \rangle|^2}{|\langle + | R | 0 T \rangle|^2}$$

не зависят от того, какой пучок проник через первый фильтр S .

§ 4. Базисные состояния

Эти результаты иллюстрируют один из основных принципов квантовой механики: любая атомная система может быть разделена процессом фильтрования на определенную совокупность того, что мы назовем *базисными состояниями*, и будущее поведение атомов в любом данном отдельном базисном состоянии зависит только от природы базисного состояния — оно не зависит от предыдущей истории *. Базисные состояния зависят, конечно, от примененного фильтра; например, три состояния $(+T)$, $(0T)$ и $(-T)$ — это одна совокупность базисных состояний, а три состояния $(+S)$, $(0S)$ и $(-S)$ — другая. Возможностей сколько угодно, и ни одна не хуже другой.

Необходимо быть осторожным, утверждая, что мы рассматриваем *хорошие* фильтры, которые действительно создают «чистые» пучки. Если, скажем, наш прибор Штерна — Герлаха недостаточно хорошо отделяет пучки друг от друга, то мы не можем произвести полного разделения на базисные состояния. Мы можем проверить, есть ли у нас чистые базисные состояния, посмотрев, смогут ли пучки опять расщепиться еще одним таким же фильтром. Если, например, имеется чистое состояние $(+T)$, то все атомы пройдут через

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right| T \right\}.$$

* Мы не собираемся вкладывать в слова «базисное состояние» что-либо сверх того, что здесь сказано. Не следует переводить «базис» как «основу» и хоть в каком-то смысле считать их «основными состояниями». Слово «базис» понимается как «система описания», скажем, в таком смысле, как в выражении «число в десятичной системе».

но ни один из них не пройдет ни через

$$\begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}, \quad T$$

ни через

$$\begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}. \quad T$$

Наше утверждение относительно базисных состояний означает, что есть возможность отфильтровать пучок до некоторого чистого состояния, так что дальнейшее фильтрование идентичным прибором уже станет невозможным.

Следует еще отметить, что все, что мы говорим, до конца верно лишь в идеализированных случаях. В каждом реальном приборе Штерна — Герлаха надо подумать и о дифракции на щелях, которая может вынудить некоторые атомы перейти в состояния, отвечающие другим углам, и о том, нет ли в пучке атомов с другой степенью возбуждения своих внутренних состояний и т. д. Мы идеализировали наш случай и говорим только о тех состояниях, которые расщепляются в магнитном поле; при этом мы игнорируем все, что касается местоположения, импульса, внутренних возбуждений и т. п. Вообще же следовало бы рассматривать также базисные состояния, рассортированные и по отношению ко всем перечисленным характеристикам. Но для простоты мы пользуемся только нашей совокупностью трех состояний. Этого вполне достаточно для того, чтобы точно рассмотреть идеализированный случай, в котором атомы не подвергаются в приборе плохому обращению, не разрываются и, более того, покидая его, оказываются в состоянии покоя.

Заметьте, что мы всегда начинаем наши мысленные эксперименты с того, что берем фильтр, у которого открыт только один канал, так что начинаем всегда с определенного базисного состояния. Мы делаем это потому, что атомы выходят из печи в различных состояниях, случайно определенных тем, что произойдет в печи. (Это дает так называемый «неполяризованный» пучок.) Эта случайность предполагает вероятности «классического» толка (как при бросании монеты), которые отличаются от интересующих нас сейчас квантовомеханических вероятностей. Работа с неполяризованным пучком привела бы нас к добавочным усложнениям, а их лучше избегать, пока мы не поймем поведения поляризованных пучков. Так что пока не пытайтесь размышлять о том, что случится, если *первый* аппарат про-

пустит сквозь себя больше одного пучка. (В конце главы мы расскажем вам, как нужно поступать и в таких случаях.)

А теперь вернемся назад и посмотрим, что будет, если мы перейдем от базисного состояния для одного фильтра к базисному состоянию для другого фильтра. Начнем опять с

$$\begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}_S \quad \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}_T.$$

Атомы, выходящие из T , оказываются в базисном состоянии $(0 T)$ и не помнят, что когда-то они побывали в состоянии $(+ S)$. Некоторые говорят, что при фильтровании прибором T мы «потеряли информацию» о былом состоянии $(+ S)$, потому что «возмущили» атомы, когда разделяли их прибором T на три пучка. Но это неверно. Прошлая информация теряется не при разделении на три пучка, а тогда, когда *ставятся перегородки*, в чем можно убедиться в следующем ряде опытов.

Начнем с фильтра $+ S$ и обозначим количество прошедших сквозь него атомов буквой N . Если мы вслед за этим поставим фильтр $0 T$, то число атомов, которое выйдет из фильтра, окажется некоторой частью от первоначального их количества, скажем αN . Если мы затем поставим второй фильтр $+ S'$, то до конца дойдет лишь часть β атомов. Это можно записать следующим образом:

$$\begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}_S \xrightarrow{N} \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}_T \xrightarrow{\alpha N} \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}_{S'} \xrightarrow{\beta \alpha N}. \quad (3.14)$$

Если наш третий прибор S' выделяет другое состояние, скажем $(0 S)$, то через него пройдет другая часть атомов, скажем γ^* . Мы будем иметь*

$$\begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}_S \xrightarrow{N} \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}_T \xrightarrow{\alpha N} \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}_{S'} \xrightarrow{\gamma \alpha N}. \quad (3.15)$$

Теперь предположим, что мы повторили оба эти опыта, убрав из T все перегородки. Тогда мы получим следующий заме-

* На языке наших прежних обозначений

$\alpha = |\langle 0 T | + S \rangle|^2, \quad \beta = |\langle + S | 0 T \rangle|^2, \quad \gamma = |\langle 0 S | 0 T \rangle|^2.$

чательный результат:

$$\begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \middle| \right\} \\ S \end{array} \xrightarrow{N} \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \middle| \right\} \\ T \end{array} \xrightarrow{N} \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \middle| \right\} \\ S' \end{array}, \quad (3.16)$$

$$\begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \middle| \right\} \\ S \end{array} \xrightarrow{N} \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \middle| \right\} \\ T \end{array} \xrightarrow{N} \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \middle| \right\} \\ S' \end{array} \xrightarrow{0}. \quad (3.17)$$

В первом случае через S' прошли *все* атомы, во втором — *ни одного!* Это один из самых великих законов квантовой механики. То, что природа действует таким образом, вовсе не самоочевидно; результаты, которые мы привели, отвечают в нашем идеализированном случае квантовомеханическому поведению, наблюдавшемуся в бесчисленных экспериментах.

§ 5. Интерферирующие амплитуды

Как же это может быть, что, когда переходят от (3.15) к (3.17), т. е. когда *открывается больше каналов*, через фильтры начинает проходить *меньше* атомов? Это и есть старый, глубокий секрет квантовой механики — интерференция амплитуд. С такого рода парадоксом мы впервые встретились в интерференционном опыте, когда электроны проходили через две щели. Помните, мы тогда увидели, что временами кое-где получается меньше электронов, когда обе щели открыты, чем когда открыта одна. Численно это получается вот как. Можно написать амплитуду того, что атом пройдет в приборе (3.17) через T и S' в виде суммы трех амплитуд — по одной для каждого из трех пучков в T ; эта сумма равна нулю:

$$\langle 0S | +T \rangle \langle +T | +S \rangle + \langle 0S | 0T \rangle \langle 0T | +S \rangle + \langle 0S | -T \rangle \langle -T | +S \rangle = 0. \quad (3.18)$$

Ни одна из трех отдельных амплитуд не равна нулю: например, квадрат модуля второй амплитуды есть γ_a [см. (3.15)], но *их сумма есть нуль*. Тот же ответ получился бы, если бы мы настроили S' на то, чтобы отбирать состояние $(-S)$. Однако при расположении (3.16) ответ уже другой. Если обозначить амплитуду прохождения через T и S' буквой a , то в этом случае мы будем

иметь *

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

В опыте (3.16) пучок сперва расщеплялся, а потом восстановливался. Как мы видим, Шалтая-Болтая удалось собрать обратно. Информация о первоначальном состоянии ($+S$) сохранилась — все выглядит так, как если бы прибора T вовсе не было. И это будет верно, что бы ни поставили за «до отказа раскрытым» прибором T . Можно поставить за ним фильтр R — под каким-нибудь необычным углом — или что-угодно. Ответ будет всегда одинаков, как будто атомы шли в S' прямо из первого фильтра S .

Итак, мы пришли к важному принципу: фильтр T или любой другой с открытыми до отказа заслонками не приводит ни к каким изменениям. Надо только упомянуть одно добавочное условие. Открытый фильтр должен не только пропускать все три пучка, но и не вызывать в них неодинаковых возмущений. Например, в нем не должно быть сильного электрического поля близ одного из пучков, которого не было бы возле других. Причина заключается вот в чем: хотя это добавочное возмущение может и не помешать всем атомам пройти сквозь фильтр, оно может привести к изменению фаз некоторых амплитуд. Тогда интерференция стала бы не такой, как была, и амплитуды (3.18) и (3.19) стали бы другими. Мы всегда будем предполагать, что таких добавочных возмущений нет.

Перепишем (3.18) и (3.19) в улучшенных обозначениях. Пусть i обозначает любое из трех состояний ($+T$), ($0T$) и ($-T$); тогда уравнения можно написать так:

$$\sum_{\text{Все } i} \langle 0S | i \rangle \langle i | +S \rangle = 0 \quad (3.20)$$

и

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

Точно так же в опыте, в котором S' заменяется совершенно произвольным фильтром R , мы имеем

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \\ S \end{array} \right\} \quad \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \\ T \end{array} \right\} \quad \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \\ R \end{array} \right\}. \quad (3.22)$$

Результаты будут всегда такими же, как если бы прибор T

* Из этого опыта мы на самом деле не можем заключить, что $a=1$, а видим только, что $|a|^2=1$, следовательно, a может быть $e^{i\delta}$, но можно показать, что при выборе $\delta=0$ мы ничего существенного здесь не потеряли.

убрали и осталось бы только

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \\ S \end{array} \middle| \right\} \quad \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \\ R \end{array} \middle| \right\}.$$

Или на математическом языке

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

Это и есть наш основной закон, и он справедлив всегда, если только i обозначает три базисных состояния любого фильтра.

Заметьте, что в опыте (3.22) никакой особой связи между S , R и T не было. Более того, рассуждения остались бы теми же независимо от того, какие состояния эти фильтры отбирают. Чтобы написать уравнение в общем виде без ссылок на какие-то особые состояния, отбираемые приборами S и R , обозначим через φ состояние, приготовляемое первым прибором (в нашем частном примере $+S$), и через χ — состояние, подвергаемое испытанию в конечном фильтре (в нашем примере $+R$). Тогда мы можем сформулировать наш основной закон (3.23) так:

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \sum_{\text{Все } i} \langle \chi | i \rangle \langle i | \varphi \rangle, \quad (3.24)$$

где i должно пробегать по всем трем базисным состояниям некоторого определенного фильтра.

Хочется опять подчеркнуть, что мы понимаем под базисными состояниями. Они напоминают тройку состояний, которые можно отобрать с помощью одного из наших приборов Штерна — Герлаха. Одно условие состоит в том, что если у вас есть базисное состояние, то будущее не зависит от прошлого. Другое условие — что если у вас есть полная совокупность базисных состояний, то формула (3.24) справедлива для любой совокупности начальных и конечных состояний φ и χ . Но не существует никакой *особой совокупности* базисных состояний. Мы начали с рассмотрения базисных состояний по отношению к прибору T . В равной мере мы бы могли рассмотреть *другую совокупность* базисных состояний — по отношению к прибору S , к прибору R и т. д.* Мы обычно говорим о базисных состояниях «в каком-то представлении».

Другое требование к совокупности базисных состояний (в том или ином частном представлении) заключается в том, что им

* И в самом деле, для атомных систем с тремя или более базисными состояниями существуют другие типы фильтров (совершенно непохожие на приборы Штерна — Герлаха), которые можно было бы употребить для выбора других совокупностей базисных состояний (но при том же *общем их числе*).

положено полностью отличаться друг от друга. Под этим мы понимаем, что если имеется состояние $(+ T)$, то для него нет амплитуды перейти в состояние $(0 T)$ или $(- T)$. Если i и j обозначают два базисных состояния в некотором представлении, то общие правила, которые мы обсуждали в связи с (3.8), говорят, что

$$\langle j | i \rangle = 0$$

для любых неравных между собой i и j . Конечно, мы знаем, что

$$\langle i | i \rangle = 1.$$

Эти два уравнения обычно пишут так:

$$\langle j | i \rangle = \delta_{ji}, \quad (3.25)$$

где δ_{ij} («символ Кронекера») — символ, равный по определению нулю при $i \neq j$ и единице при $i = j$.

Уравнение (3.25) не независимо от остальных законов, о которых мы упоминали. Бывает, что нас не особенно интересует математическая задача поиска наименьшей совокупности независимых аксиом, из которых все законы проистекут как следствия. Нам вполне достаточно обладать совокупностью, которая полна и по виду непротиворечива. Однако мы беремся показать, что (3.25) и (3.24) не независимы. Пусть φ в (3.24) представляет одно из базисных состояний той же совокупности, что и i , скажем j -е состояние; тогда мы имеем

$$\langle \chi | j \rangle = \sum_i \langle \chi | i \rangle \langle i | j \rangle.$$

Но (3.25) утверждает, что $\langle i | j \rangle$ равно нулю, если только i не равно j , так что сумма обращается просто в $\langle \chi | j \rangle$ и получается тождество, что говорит о том, что эти два закона не независимы.

Можно видеть, что если справедливы оба уравнения (3.25) и (3.24), то между амплитудами должно существовать еще одно соотношение. Уравнение (3.10) имело вид

$$\begin{aligned} & \langle +T | +S \rangle \langle +T | +S \rangle^* + \langle 0T | +S \rangle \langle 0T | +S \rangle^* + \\ & + \langle -T | +S \rangle \langle -T | +S \rangle^* = 1. \end{aligned}$$

Если теперь посмотреть на (3.24) и предположить, что и φ , и χ — это состояние $(+S)$, то слева получится $\langle +S | +S \rangle$, а это, конечно, равно единице, и мы должны получить (3.19)

$$\begin{aligned} & \langle +S | +T \rangle \langle +T | +S \rangle + \langle +S | 0T \rangle \langle 0T | +S \rangle + \\ & + \langle +S | -T \rangle \langle -T | +S \rangle = 1. \end{aligned}$$

Эти два уравнения согласуются друг с другом (для всех относительных ориентаций приборов T и S) только тогда, когда

$$\begin{aligned}\langle +S|+T\rangle &= \langle +T|+S\rangle^*, \\ \langle +S|0T\rangle &= \langle 0T|+S\rangle^*, \\ \langle +S|-T\rangle &= \langle -T|+S\rangle^*.\end{aligned}$$

Стало быть, для любых состояний φ и χ

$$\langle\varphi|\chi\rangle = \langle\chi|\varphi\rangle^*. \quad (3.26)$$

Если бы этого не было, вероятности «не сохранились бы» и частицы «терялись бы».

Прежде чем идти дальше, соберем все три общих закона для амплитуд. т. е. (3.24) — (3.26):

- I. $\langle j|i\rangle = \delta_{ji},$
- II. $\langle\chi|\varphi\rangle = \sum_{\text{Все } i} \langle\chi|i\rangle \langle i|\varphi\rangle, \quad (3.27)$
- III. $\langle\varphi|\chi\rangle = \langle\chi|\varphi\rangle^*.$

В этих уравнениях i и j относятся ко *всем* базисным состояниям какого-то *одного* представления, тогда как φ и χ — это любое возможное состояние атома. Важно отметить, что закон II справедлив лишь тогда, когда суммирование проводится по *всем* базисным состояниям системы (в нашем случае по трем: $+T$, $0T$, $-T$). Эти законы ничего не говорят о том, что следует избирать в качестве базиса. Мы начали с прибора T , который является опытом Штерна — Герлаха с какой-то произвольной ориентацией, но и всякая другая ориентация, скажем W , тоже подошла бы. Вместо i и j нам пришлось бы ставить другую совокупность базисных состояний, но все законы остались бы правильными; какой-то единственной совокупности не существует. Успех в квантовой механике часто определяется тем, умеете ли вы использовать тот факт, помня, что расчет можно вести из-за этого разными путями.

§ 6. Механика квантовой механики

Мы покажем вам сейчас, почему полезны эти законы. Пусть у нас есть атом в заданном состоянии (под этим мы подразумеваем, что он как-то был приготовлен), и мы хотим знать, что с ним будет в таком-то опыте. Иными словами, мы начинаем с состояния φ атома и хотим знать, каковы *шансы*, что он пройдет через прибор, который пропускает атомы только в состоянии χ . Законы говорят, что мы можем полностью описать прибор тремя комплекс-

ными числами $\langle \chi | i \rangle$ — амплитудами того, что каждое из базисных состояний окажется в состоянии χ , и что мы, пустив атом в прибор, можем предсказать, что произойдет, если опишем состояние атома, задав три числа $\langle i | \phi \rangle$, — амплитуды того, что атом из своего первоначального состояния перейдет в любое из трех базисных состояний. Это очень и очень важная идея.

Рассмотрим другую иллюстрацию. Подумаем о следующей задаче. Начинаем с прибора S , затем имеется какая-то сложная мешаница, которую мы обозначаем A , а дальше стоит прибор R :

$$\begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \\ S \end{array} \quad \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} A \end{array} \right\} \\ R \end{array} \quad \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \\ R \end{array}. \quad (3.28)$$

Под A мы подразумеваем любое сложное расположение приборов Штерна — Герлаха — с перегородками и полуперегородками, под всевозможными углами, с необычными электрическими и магнитными полями, — словом, годится все, что вам придет в голову. (Очень приятно ставить мысленные эксперименты — тогда нас не тревожат никакие заботы, возникающие при реальном сооружении приборов!) Задача состоит в следующем: с какой амплитудой частица, входящая в область A в состоянии $(+S)$, выйдет из него в состоянии $(0R)$, так что сможет пройти через последний фильтр R ? Имеется стандартное обозначение для такой амплитуды:

$$\langle 0R | A | +S \rangle.$$

Как обычно, это надо читать справа налево:

$$\langle \text{Конец} | \text{Через} | \text{Начало} \rangle.$$

Если случайно окажется, что A ничего не меняет, а просто является открытым каналом, тогда мы пишем

$$\langle 0R | 1 | +S \rangle = \langle 0R | +S \rangle; \quad (3.29)$$

эти два символа равнозначны. В более общих задачах мы можем заменить $(+S)$ общим начальным состоянием ϕ , а $(0R)$ — общим конечным состоянием χ и захотеть узнать амплитуду

$$\langle \chi | A | \phi \rangle.$$

Полный анализ прибора A должен был бы дать нам амплитуду $\langle \chi | A | \phi \rangle$ для каждой мыслимой пары состояний ϕ и χ — бесконечное количество комбинаций! Как же сможем мы тогда дать краткое описание поведения прибора A ? Это можно сделать следующим путем. Вообразим, что мы видоизменили при-

бор (3.28) так:

$$\begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}_S \quad \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}_T \quad \begin{Bmatrix} A \end{Bmatrix} \quad \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}_T \quad \begin{Bmatrix} + \\ 0 \\ - \end{Bmatrix}_R. \quad (3.30)$$

На самом деле это вовсе не видоизменение, потому что широко раскрыты приборы T ничего нигде не меняют. Но они подсказывают нам, как проанализировать проблему. Имеется определенная совокупность амплитуд $\langle i | +S \rangle$ того, что атомы из S перейдут в состояние i прибора T . Затем имеется другая совокупность амплитуд того, что состояние i (по отношению к T), войдя в A , выйдет оттуда в виде состояния j (по отношению к T). И наконец, имеется амплитуда того, что каждое состояние j пройдет через последний фильтр в виде состояния $(0 R)$. Для каждого допустимого пути существует амплитуда вида

$$\langle 0 R | j \rangle \langle j | A | i \rangle \langle i | +S \rangle,$$

и полная амплитуда есть сумма членов, которые можно получить из всех сочетаний i и j . Нужная нам амплитуда равна

$$\sum_j \langle 0 R | j \rangle \langle j | A | i \rangle \langle i | +S \rangle. \quad (3.31)$$

Если $(0 R)$ и $(+ S)$ заменить общими состояниями χ и φ , то получится выражение такого же рода; так что общий результат выглядит так:

$$\langle \chi | A | \varphi \rangle = \sum_{ij} \langle \chi | j \rangle \langle j | A | i \rangle \langle i | \varphi \rangle. \quad (3.32)$$

Теперь заметьте, что правая часть (3.32) на самом деле «проще» левой части. Прибор A полностью описан девятью числами $\langle j | A | i \rangle$, сообщающими, каков отклик A на три базисных состояния прибора T . Как только мы узнаем эту девятку чисел, мы сможем управиться с любой парой входных и выходных состояний φ и χ , если только определим каждое из них через три амплитуды перехода в каждое из трех базисных состояний (или выхода из них). Результат опыта предсказывается с помощью уравнения (3.32).

В этом и состоит основной вывод квантовой механики частицы со спином 1. Каждое состояние описывается тройкой чисел — амплитудами пребывания в каждом из базисных состояний (из избранной их совокупности). Всякий прибор описывается девяткой чисел — амплитудами перехода в приборе из одного базисного состояния в другое. Зная эти числа, можно подсчитать что угодно.

Девятка амплитуд, описывающая прибор, часто изображается в виде квадратной матрицы, именуемой матрицей $\langle j | A | i \rangle$:

	Из		
B	+	0	-
+	$\langle + A + \rangle$	$\langle + A 0 \rangle$	$\langle + A - \rangle$
0	$\langle 0 A + \rangle$	$\langle 0 A 0 \rangle$	$\langle 0 A - \rangle$.
-	$\langle - A + \rangle$	$\langle - A 0 \rangle$	$\langle - A - \rangle$

(3.33)

Вся математика квантовой механики является простым расширением этой идеи. Приведем несложный пример. Пусть имеется прибор C , который мы хотим проанализировать, т. е. рассчитать различные $\langle j | C | i \rangle$. Скажем, мы хотим знать, что случится в эксперименте типа

$$\left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\} \quad \left\{ \begin{array}{c} C \\ | \end{array} \right\} \quad \left\{ \begin{array}{c} + \\ 0 \\ - \end{array} \right\}. \quad (3.34)$$

$S \qquad \qquad \qquad R$

Но затем мы замечаем, что C просто состоит из двух частей: стоящих друг за другом приборов A и B . Сперва частицы проходят через A , а потом — через B , т. е. можно символически записать

$$\left\{ \begin{array}{c} C \\ | \end{array} \right\} = \left\{ \begin{array}{c} A \\ | \end{array} \right\} \cdot \left\{ \begin{array}{c} B \\ | \end{array} \right\}. \quad (3.35)$$

Мы можем прибор C назвать «произведением» A и B . Допустим также, что мы уже знаем, как эти две части анализировать; таким образом, мы можем узнать матрицы A и B (по отношению к T). Тогда наша задача решена. Мы легко найдем $\langle \chi | C | \varphi \rangle$ для любых входных и выходных состояний. Сперва мы напишем

$$\langle \chi | C | \varphi \rangle = \sum_k \langle \chi | B | k \rangle \langle k | A | \varphi \rangle.$$

Понимаете, почему? (*Подсказка:* представьте, что между A и B поставлен прибор T .) Если мы затем рассмотрим особый случай, когда φ и χ также базисные состояния (прибора T), скажем i и j , то получим

$$\langle j | C | i \rangle = \sum_k \langle j | B | k \rangle \langle k | A | i \rangle. \quad (3.36)$$

Это уравнение дает нам матрицу прибора «произведения» C через матрицы приборов A и B . Математики именуют новую матрицу $\langle j | C | i \rangle$, образованную из двух матриц $\langle j | B | i \rangle$ и $\langle j | A | i \rangle$ в соответствии с правилом, указанным в (3.36), матричным «произведением» BA двух матриц B и A . (Заметьте, что *порядок* существен, $AB \neq BA$.) Итак, можно сказать, что матрица для стоящих друг за другом двух частей прибора — это матричное произведение матриц для этих двух приборов

порознь (причем *первый* прибор стоит в произведении *справа*). И каждый, кто знает матричную алгебру, поймет, что речь идет просто об уравнении (3.36).

§ 7. Преобразование к другому базису

Мы хотим сделать одно заключительное замечание относительно базисных состояний, используемых в расчетах. Предположим, мы захотели работать с каким-то определенным базисом, скажем с базисом S , а кто-то другой решает провести те же расчеты с другим базисом, скажем с базисом T .

Для конкретности назовем наши базисные состояния состояниями $\langle iS | \phi \rangle$, где $i = +, 0, -$, а его базисные состояния назовем $\langle jT | \phi \rangle$. Как сравнить его работу с нашей? Окончательные ответы для результатов любых измерений обязаны оказаться одинаковыми, но употребляемые в самих расчетах всевозможные матрицы и амплитуды будут другими.

Как же они соотносятся? К примеру, если оба мы начинаем с одного и того же ϕ , то мы опишем это ϕ на языке трех амплитуд $\langle iS | \phi \rangle$ — амплитудой того, что ϕ переходит в наши базисные состояния в представлении S , а он опишет это ϕ амплитудами $\langle jT | \phi \rangle$ — амплитудами того, что состояние ϕ переходит в базисные состояния в его, T , представлении. Как проверить, что мы оба на самом деле говорим об одном и том же состоянии ϕ ? Это можно сделать с помощью нашего общего правила II [см. (3.27)]. Заменяя χ любым из *его* состояний jT , напишем

$$\langle jT | \phi \rangle = \sum_i \langle jT | iS \rangle \langle iS | \phi \rangle. \quad (3.37)$$

Чтобы связать оба представления, нужно задать только девять комплексных чисел — матрицу $\langle jT | iS \rangle$. Эту матрицу затем можно использовать для того, чтобы перевести все его уравнения в нашу форму. Она сообщает нам, как *преобразовать* одну совокупность базисных состояний в другую. (По этой причине $\langle jT | iS \rangle$ иногда именуют «матрицей преобразования от представления S к представлению T ». Слова ученыe!)

Для случая частиц со спином 1, у которых бывает только тройка базисных состояний (у высших спинов их больше), математическая ситуация напоминает то, что мы видели в векторной алгебре. Каждый вектор может быть представлен тремя числами — компонентами вдоль осей x , y и z . Иначе говоря, всякий вектор может быть разложен на три «базисных» вектора, т. е. векторы вдоль этих трех осей. Но предположим, что кто-то другой решает выбрать другую тройку осей: x' , y' и z' . Чтобы представить любой частный вектор, он воспользуется другими (а не теми, что мы) числами. Его выкладки не будут похожи на наши, но окончательный итог окажется таким же. Мы это уже

рассматривали раньше и знаем правила преобразования векторов от одной тройки осей к другой.

Вам может захочется увидеть, как действуют квантовомеханические преобразования, и самим попробовать их проделать; для этого мы приведем здесь без вывода матрицы преобразований амплитуд спина 1 от представления S к другому представлению T для разных взаимных ориентаций фильтров S и T . (В следующих главах мы покажем, как получаются эти результаты.)

Первый случай. У прибора T ось y (вдоль которой движутся частицы) та же самая, что и у S , но T повернут вокруг общей оси y на угол α (на фиг. 3.6). (Чтобы быть точными, укажем, что в приборе T установлена система координат x' , y' , z' , связанная с координатами x , y , z прибора S формулами $z' = z \cos \alpha + x \sin \alpha$; $x' = x \cos \alpha - z \sin \alpha$; $y' = y$.) Тогда амплитуды преобразований таковы:

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

Второй случай. Прибор T имеет ту же ось z , что и S , но повернут относительно оси z на угол β . (Преобразование координат: $z' = z$; $x' = x \cos \beta + y \sin \beta$; $y' = y \cos \beta - x \sin \beta$.) Тогда амплитуды преобразований суть

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

Все прочие = 0.

Заметьте, что любые вращения T можно составить из описанных двух вращений.

Если состояние φ определяется тремя числами

$$C_+ = \langle +S | \varphi \rangle, \quad C_0 = \langle 0S | \varphi \rangle, \quad C_- = \langle -S | \varphi \rangle \quad (3.40)$$

и если то же состояние описывается с точки зрения T тремя числами

$$C'_+ = \langle +T | \varphi \rangle, \quad C'_0 = \langle 0T | \varphi \rangle, \quad C'_- = \langle -T | \varphi \rangle, \quad (3.41)$$

тогда коэффициенты $\langle jT | iS \rangle$ из (3.38) и (3.39) дают преобразования, связывающие C_i и C'_i . Иными словами, C_i очень походят на компоненты вектора, который с точек зрения S и T выглядит по-разному.

Только у частицы со спином 1 (потому что ей требуются как раз три амплитуды) есть такое тесное соответствие с векторами. Здесь во всех случаях имеется тройка чисел, которая обязана преобразовываться при изменениях координат определенным известным образом. И действительно, здесь есть и такая совокупность базисных состояний, которая преобразуется в точности, как три компоненты вектора. Три комбинации

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

преобразуются в C'_x , C'_y , C'_z как раз так же, как x , y , z преобразуются в x' , y' , z' . [Вы можете проверить это с помощью законов преобразований (3.38) и (3.39).] Теперь вы понимаете, почему частицу со спином 1 часто называют «векторной частицей».

§ 8. Другие случаи

Мы начали с того, что подчеркнули, что наши рассуждения о частице со спином 1 являются прототипом любых квантовомеханических задач. Обобщения требует только количество состояний. Вместо тройки базисных состояний в других случаях может потребоваться n базисных состояний *. Форма наших основных законов (3.27) останется той же, если только понимать, что i и j должны пробегать по всем n базисным состояниям. Любое явление можно проанализировать, задав амплитуды того, что оно начинается с любого базисного состояния и кончается тоже в любом базисном состоянии, а затем просуммировав по всей

* Число базисных состояний n может оказаться (и, вообще говоря, бывает) равным бесконечности.

полнейшей системе базисных состояний. Можно использовать любую подходящую систему базисных состояний, и каждый вправе выбрать ту, которая ему по душе; связь между любой парой базисов осуществляется матрицей преобразований $n \times n$. Позже мы подробнее расскажем об этих преобразованиях.

Наконец, мы пообещали рассказать о том, что надо делать, если атомы прямо из печи проходят через какой-то прибор A и затем анализируются фильтром, который отбирает состояние χ . Вы не знаете, каково то состояние ϕ , в котором они входят в прибор. Лучше всего, наверное, было бы, если бы вы, не думая пока об этой проблеме, занимались такими задачами, в которых вначале имеются только чистые состояния. Но если уж вы на этом настаиваете, так вот как расправляются с этой проблемой.

Прежде всего вы должны быть в состоянии сделать разумные предположения о том, каким образом распределены состояния в атомах, которые выходят из печи. Например, если в печи нет чего-либо «особого», то разумно предположить, что атомы покидают печь, будучи «ориентированы» как попало. Квантовомеханически это соответствует вашему утверждению о том, что о состояниях вы не знаете ничего, кроме того, что третья атомов находится в состоянии $(+S)$, третья — в состоянии $(0S)$ и третья — в состоянии $(-S)$. Для пребывающих в состоянии $(+S)$ амплитуда пройти сквозь A есть $\langle \chi | A | +S \rangle$, а вероятность $|\langle \chi | A | +S \rangle|^2$. То же и для других. Общая вероятность тогда равна

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

Но почему мы пользовались S , а не T или каким-нибудь другим представлением? Дело в том, что, как это ни странно, ответ не зависит от того, каким было исходное разложение; он один и тот же, если только мы имеем дело с совершенно случайными ориентациями. Таким же образом получается, что

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

для любого χ . (Докажите-ка это сами!)

Заметьте, что неверно говорить, будто входные состояния обладают амплитудой $\sqrt{1/3}$ быть в состоянии $(+S)$, $\sqrt{1/3}$ в состоянии $(0S)$ и $\sqrt{1/3}$ в состоянии $(-S)$; если бы это было так, были бы допустимы какие-то интерференции. Здесь вы просто не знаете, каково начальное состояние; вы обязаны думать на языке вероятностей, что система сперва находится во всевозможных мыслимых начальных состояниях, и затем взять средневзвешенное по всем возможностям.

СПИН ОДНА ВТОРАЯ*

§ 1. Преобразование амплитуд

§ 2. Преобразование к повернутой системе координат

§ 3. Повороты вокруг оси z

§ 4. Повороты на 180° и на 90° вокруг оси y

§ 5. Повороты вокруг оси x

§ 6. Произвольные повороты

§ 1. Преобразование амплитуд

В предыдущей главе мы, пользуясь в качестве примера системой со спином 1, набросали общие принципы квантовой механики.

Любое состояние ψ можно описать через совокупность базисных состояний, задав амплитуды пребывания в каждом из них.

Амплитуда перехода из одного состояния в другое может быть в общем случае записана в виде суммы произведений амплитуд перехода в одно из базисных состояний на амплитуды перехода из этих базисных состояний в конечное положение; в сумму непременно входят члены, относящиеся к каждому базисному состоянию:

$$\langle \chi | \psi \rangle = \sum_i \langle \chi | i \rangle \langle i | \psi \rangle. \quad (4.1)$$

Базисные состояния ортогональны друг другу — амплитуда пребывания в одном, если вы находитесь в другом, есть нуль:

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij}. \quad (4.2)$$

Амплитуда перехода из одного состояния в другое комплексно сопряжена амплитуде обратного перехода

$$\langle \chi | \psi \rangle^* = \langle \psi | \chi \rangle. \quad (4.3)$$

* Эта глава — не что иное, как весьма абстрактное и длинное отступление от основной линии рассказа; в ней нет каких-либо новых идей, которые бы не появлялись иным путем в дальнейших главах. Поэтому можете спокойно пропустить ее, а позже, если заинтересуетесь, вернуться.

Мы немножко поговорили о том, что базис для состояний может быть не один и что можно использовать (4.1), чтобы перейти от одного базиса к другому. Пусть, например, мы знаем амплитуды $\langle iS | \psi \rangle$ обнаружения состояния ψ в любом из базисных состояний i базисной системы S , но затем решаем, что лучше описывать состояние в терминах другой совокупности базисных состояний — скажем, состояний j , принадлежащих к базису T . Мы тогда можем подставить в общую формулу (4.1) jT вместо χ и получить

$$\langle jT | \psi \rangle = \sum_i \langle jT | iS \rangle \langle iS | \psi \rangle. \quad (4.4)$$

Амплитуды обнаружения состояния (ψ) в базисных состояниях (jT) связаны с амплитудами его обнаружения в базисных состояниях (iS) совокупностью коэффициентов $\langle jT | iS \rangle$. Если базисных состояний N , то таких коэффициентов всего N^2 . Эту совокупность коэффициентов часто называют «матрицей преобразования от представления S к представлению T ». Математически это выглядит страшновато, но стоит все чуть обозначить иначе и оказывается, что ничего страшного нет. Если обозначить через C_i амплитуду того, что состояние ψ находится в базисном состоянии iS , т. е. $C_i = \langle iS | \psi \rangle$, а через C'_j назвать соответствующие амплитуды для базисной системы T , т. е. $C'_j = \langle jT | \psi \rangle$, то (4.4) можно записать в виде

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

где R_{ji} — то же самое, что и $\langle jT | iS \rangle$. Каждая амплитуда C'_j есть сумма по всем i одного ряда коэффициентов R_{ji} , умноженных на каждую амплитуду C_i . Это выглядит так же, как преобразование вектора от одной системы координат к другой.

Но не будем слишком долго увлекаться абстракцией. Мы уже приводили парочку примеров этих коэффициентов для случая спина 1, и вы сами можете разобраться, как ими пользоваться практически. Но, с другой стороны, у квантовой механики существует очень красивое качество: из того факта, что состояний только три, используя лишь свойства симметрии пространства относительно вращений, она умеет чисто отвлеченным путем вычислить эти коэффициенты. Приводить на столь ранней стадии эти рассуждения было бы нехорошо: прежде чем вы «вернулись бы на землю», вы могли бы утонуть в новом море абстракций. Однако все это так красиво, что мы в свое время это непременно проделаем.

В этой же главе мы покажем вам, как можно получить коэффициенты преобразований для частиц со спином $1/2$. Мы выбрали этот случай потому, что он проще спина 1. Задача состоит в том, чтобы определить коэффициенты R_{ji} для частицы, или атомной системы, которая в аппарате Штерна — Герлаха

расщепляется на два пучка. Мы собираемся вывести все коэффициенты для преобразования от одного представления к другому путем чистого рассуждения плюс несколько предположений. *Какие-то* предположения всегда нужны для того, чтобы пользоваться «чистыми» рассуждениями! Хотя наши доказательства будут абстрактными и немного запутанными, результат, который мы получим, сформулировать легко и понять просто; сам же по себе он будет очень важным. Можете, если угодно, рассматривать это как своего рода культмероприятие. Мы ведь условились уже, что все существенное, выведенное здесь, будет также выводиться по мере надобности в следующих главах другим путем. Так что вы не бойтесь потерять нить нашего изложения квантовой механики, если полностью пропустите эту главу или изучите ее попозже. Мероприятие «культурное» в том смысле, что оно должно показать вам, что принципы квантовой механики не только любопытны, но и настолько глубоки, что, прибавив к ним всего несколько добавочных гипотез о структуре пространства, мы сможем вывести огромное множество свойств физических систем. Кроме того, важно понимать, откуда вытекают различные следствия квантовой механики. Пока наши законы физики неполны (а так оно и есть на самом деле), всегда интересно выяснить, в каких местах наши теории перестают согласовываться с опытом — там ли, где наша логика самая лучшая, или же там, где она наихудшая. До сих пор оказывалось, что там, где наша логика наиболее абстрактна, там она всегда дает правильные результаты — теория согласуется с опытом. Только тогда, когда мы пытаемся строить конкретные модели внутреннего устройства элементарных частиц и их взаимодействий, только тогда мы оказываемся не в состоянии найти теорию, согласную с экспериментом. Та теория, которую мы намерены описать здесь, согласуется с опытом всюду, где ее испытывали; она так же хороша для странных частиц, как и для электронов, протонов и т. д.

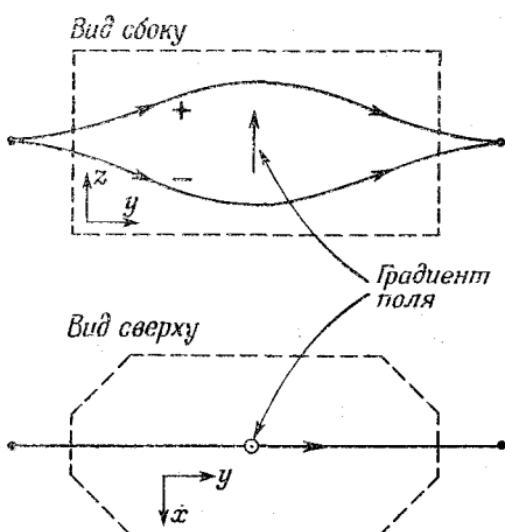
Еще одно неприятное (но важное) замечание: коэффициенты R_{ji} невозможно определить однозначно, потому что в амплитудах вероятностей всегда есть какой-то произвол. Если у вас есть ряд каких угодно амплитуд, скажем амплитуд прихода в некоторое место по целому множеству различных путей, и если вы помножите каждую отдельную амплитуду на один и тот же фазовый множитель, скажем на $e^{i\phi}$, то получится другая совокупность, которая будет ничуть не хуже первой. Значит, всегда можно произвольно изменить фазу всех амплитуд в любой задаче, если вы этого захотите.

Допустим, вы вычисляете некоторую вероятность, беря сумму нескольких амплитуд, скажем $(A + B + C + \dots)$, и возводя ее модуль в квадрат. Затем кто-то другой вычисляет то же самое, складывая амплитуды $(A' + B' + C' + \dots)$

и возводя их модуль в квадрат. Если все A' , B' , C' и т. д. отличаются от A , B , C и т. д. только множителем $e^{i\delta}$, то все вероятности, получаемые возведением модуля в квадрат, окажутся в точности одинаковыми, потому что тогда $(A' + B' + C' + \dots)$ равно $e^{i\delta}(A + B + C + \dots)$. Или допустим, к примеру, что мы считали что-нибудь по уравнению (4.1), но затем внезапно изменили все фазы определенной базисной системы. Каждую из амплитуд $\langle i | \psi \rangle$ тогда пришлось бы умножить на один и тот же множитель $e^{i\delta}$. Точно так же изменились бы в $e^{i\delta}$ раз и все амплитуды $\langle i | \chi \rangle$, но амплитуды $\langle \chi | i \rangle$ комплексно сопряжены амплитудам $\langle i | \chi \rangle$; тем самым они приобрели бы множитель $e^{-i\delta}$. Плюс и минус $i\delta$ в экспонентах уничтожаются, и получится то же выражение, что было и раньше. Стало быть, общее правило таково, что изменение на одну и ту же фазу всех амплитуд по отношению к данной базисной системе или даже простое изменение *всех* амплитуд в любой задаче на одну и ту же фазу ничего не меняет. Значит, существует некоторая свобода в выборе фаз нашей матрицы преобразования. Мы то и дело будем прибегать к такому произвольному выбору, всегда следуя общепринятым соглашениям.

§ 2. Преобразование к повернутой системе координат

Рассмотрим опять «усовершенствованный» прибор Штерна—Герлаха, описанный в предыдущей главе. Пучок частиц со спином $1/2$, входящих слева, расщепляется, вообще говоря, на два пучка, как показано схематически на фиг. 4.1. (При спине 1 пучков было три.) Как и раньше, пучки в конце снова сводятся в одно место, если только один из них не будет перекрыт «пере-

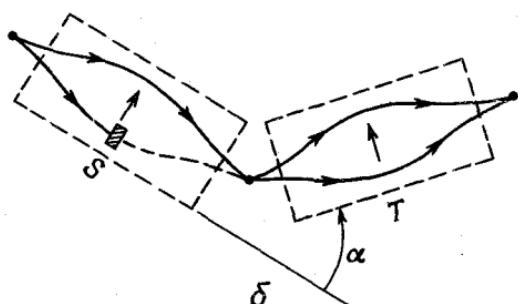
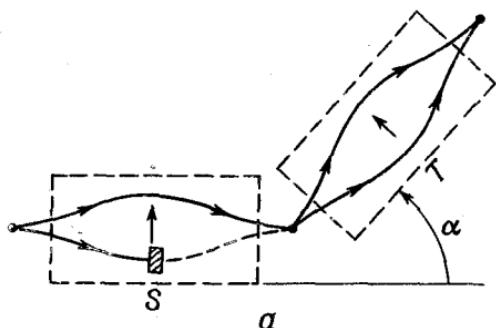


Фиг. 4.1. «Усовершенствованный» прибор Штерна — Герлаха с пучками частиц со спином $1/2$

городкой», которая перехватит его на полпути. На рисунке имеется стрелка, которая показывает направление роста величины поля, скажем положение магнитного полюса с острым наконечником. Эта стрелка пусть будет представлять собой направление вверх для данного прибора. В каждом аппарате ее положение фиксировано, что позволяет указывать взаимную ориентацию нескольких приборов относительно друг друга. Наконец, предположим еще, что направление магнитного поля относительно стрелки во всех магнитах одинаково.

Будем говорить, что атомы из «верхнего» пучка находятся *по отношению к этому прибору* в состоянии $(+)$, атомы из «нижнего» — в состоянии $(-)$. (Нуль-состояния для спина $\frac{1}{2}$ не существует.)

Положим теперь, что мы поставили два наших усовершенствованных прибора Штерна — Герлаха один за другим (фиг. 4.2, *a*). Первый (назовем его *S*) можно употребить на то, чтобы приготавливать чистое состояние $(+S)$ или $(-S)$, загораживая то один, то другой пучок. [На рисунке приготавливается чистое состояние $(+S)$.] При любом расположении всегда есть некоторая амплитуда того, что частица, выходящая из *S*, окажется в пучке $(+T)$ или $(-T)$ второго прибора. Всего таких амплитуд четыре: амплитуды перехода от $(+S)$ к $(+T)$, от $(+S)$ к $(-T)$, от $(-S)$ к $(+T)$ и от $(-S)$ к $(-T)$. Эти амплитуды —



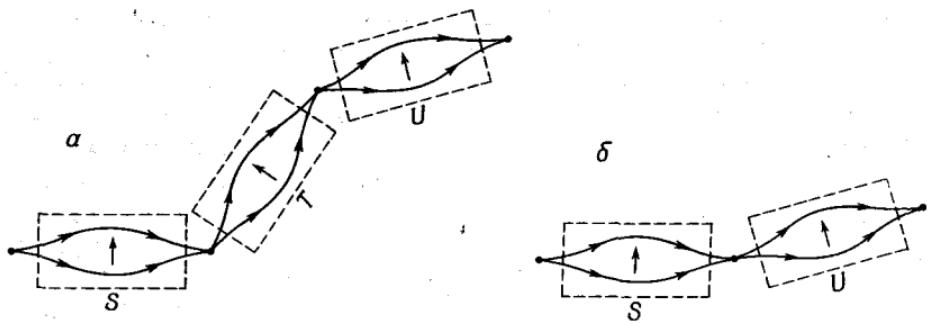
Фиг. 4.2. Два эквивалентных эксперимента.

просто четыре коэффициента матрицы преобразования R_{ji} перехода от представления S к представлению T . Можно считать, что первый прибор «приготавляет» определенное состояние в одном представлении, а второй «анализирует» это состояние в терминах второго представления. Мы хотим научиться отвечать на такие вопросы: если, загородив один из пучков в S , мы подготовили атом в данном состоянии, например в состоянии $(+S)$, то каково будет изменение, которое он испытает, пройдя через прибор T , который настроен на состояние $(-T)$? Результат, конечно, будет зависеть от углов между системами S и T .

Мы должны объяснить, почему есть надежда найти коэффициенты R_{ji} теоретически. Почти невозможно поверить, что если у частиц спин был выстроен в направлении $+z$, то есть хоть какой-то шанс обнаружить, что ее спин ориентирован в направлении $+x$ или в каком-либо другом направлении. Это действительно *почти* невозможно. Но все же не совсем. Это настолько невозможно, что остается *лишь один путь*, каким это происходит, а если этот путь один, то его уже можно найти.

Первое рассуждение можно провести так. Предположим, что, как показано на фиг. 4.2, *a*, прибор T направлен вверх под углом α относительно S . Пусть через S проходит только пучок $(+)$, а через T — только пучок $(-)$. Мы измерили некоторую вероятность того, что частицы, выходя из S , пройдут сквозь T . Теперь предположим, что мы делаем второе измерение прибором, показанным на фиг. 4.2, *b*. Относительная ориентация S и T одинакова, но вся система расположена в пространстве под другим углом. Мы хотим предположить, что оба опыта приведут к одному и тому же значению вероятности того, что частица в чистом состоянии относительно S окажется в некотором определенном состоянии относительно T . Иными словами, мы предполагаем, что результат любого опыта такого рода одинаков, что сама физика одинакова, как бы *весь* прибор ни был ориентирован в пространстве. (Вы скажете: «Это самоочевидно». Но это *все же* только предположение, и оно «правильно» только тогда, если так действительно бывает.) Это означает, что коэффициенты R_{ji} зависят лишь от взаимного расположения S и T в пространстве, а не от абсолютного их расположения. Выражаясь иначе, R_{ji} зависит только от *поворота*, который переводит S в T , потому что общим для фиг. 4.2, *a* и *b*, очевидно, является трехмерный поворот, переводящий прибор S в положение прибора T . Когда матрица преобразования R_{ji} зависит, как в нашем случае, только от поворота, ее называют *матрицей поворота*.

Для следующего шага нужно еще немного информации. Пусть мы добавили третий прибор (назовем его U), стоящий вслед за T под каким-то произвольным углом (фиг. 4.3, *a*). (Все это начинает выглядеть устрашающе, но в этом-то и пре-



Фиг. 4.3. Если T «открыт до отказа», то b эквивалентно a .

лость отвлеченного мышления: самые сверхъестественные опыты можно ставить, просто проводя новые линии!) Что же представляет собой преобразование $S \rightarrow T \rightarrow U$? Фактически нас интересует амплитуда перехода из некоторого состояния по отношению к S к некоторому другому состоянию по отношению к U , если известны преобразования от S к T и от T к U . Понterесуемся сперва опытом, в котором в T открыты оба канала. Ответ можно получить, дважды подряд применяя (4.5). Для перехода от S -представления к T -представлению имеем

$$C'_j = \sum_i R_{ji}^{TS} C_i, \quad (4.6)$$

где верхние индексы TS нужны, чтобы отличать это R от R^{UT} , когда мы будем переходить от T к U .

Обозначая амплитуды появления атома в базисных состояниях представления U через C''_k , можно связать их с T -амплитудами, применяя (4.5) еще раз; получим

$$C''_k = \sum_j R_{kj}^{UT} C'_j. \quad (4.7)$$

Теперь можно из (4.6) и (4.7) получить преобразование от S прямо к U . Подставляя C'_j из (4.6) в (4.7), имеем

$$C''_k = \sum_j R_{kj}^{UT} \sum_i R_{ji}^{TS} C_i. \quad (4.8)$$

Или, поскольку в R_{kj}^{UT} отсутствует i , можно поставить суммирование по i впереди и написать

$$C''_k = \sum_i \sum_j R_{kj}^{UT} R_{ji}^{TS} C_i. \quad (4.9)$$

Это и есть формула двойного преобразования.

Заметьте, однако, что, пока пучки в T не загораживаются, состояния на выходе из T те же, что и при входе в него. Мы могли бы с равным успехом делать преобразования из S -представления

прямо в представление U . Это значило бы, что прибор U поставлен прямо за S , как на фиг. 4.3, б. В этом случае мы бы написали

$$C_k'' = \sum_i R_{ki}^{US} C_i, \quad (4.10)$$

где R_{ki}^{US} — коэффициенты, принадлежащие этому преобразованию. Но ясно, что (4.9) и (4.10) должны приводить к одинаковым амплитудам C_k'' , причем независимо от того, каково было то начальное состояние φ , которое снабдило нас амплитудами C_i . Значит, должно быть

$$R_{ki}^{US} = \sum_j R_{kj}^{UT} R_{ji}^{TS}. \quad (4.11)$$

Иными словами, для любого поворота $S \rightarrow U$ базиса, если рассматривать его как два последовательных поворота $S \rightarrow T$ и $T \rightarrow U$, можно получить матрицу поворота R_{ki}^{US} из матриц двух частных поворотов при помощи формулы (4.11). Если угодно, (4.11) следует прямо из (4.1) и представляет собой лишь другую запись формулы:

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

• • •

Для полноты добавим еще следующее. Но не думайте, что это будет что-то страшно важное; если хотите, переходите, не читая, прям к следующему параграфу. Надо сознаться, что то, что мы сказали, не совсем верно. Мы не можем на самом деле утверждать, что (4.9) и (4.10) обязаны привести к *абсолютно одинаковым* амплитудам. Одинаковыми должны оказаться только *физические результаты*; сами же амплитуды могут отличаться на общий фазовый множитель типа $e^{i\delta}$, не меняя результатов никаких расчетов, касающихся реального мира. Иначе говоря, вместо (4.11) единственное, что можно утверждать, — это

$$e^{i\delta} R_{ki}^{US} = \sum_j R_{kj}^{UT} R_{ji}^{TS}, \quad (4.12)$$

где δ — *какая-то* вещественная постоянная величина. Смысл этого добавочного множителя $e^{i\delta}$, конечно, в том, что амплитуды, которые мы получим, пользуясь матрицей R^{US} , могут все отличаться на одну и ту же фазу ($e^{-i\delta}$) от амплитуд, которые получились бы из двух поворотов R^{UT} и R^{TS} . Но мы знаем, что если все амплитуды изменить на одинаковую фазу, то это ни на чем не скажется. Так что при желании можно этот фазовый множитель просто игнорировать. Оказывается, однако, что если определить нашу матрицу поворота особым образом, то этот фазовый множитель вообще не появится: δ в (4.12) всегда будет нулем. Хотя это и не отражается на наших дальнейших

рассуждениях, мы беремся это быстро доказать, пользуясь математической теоремой о детерминантах. [А если вы до сих пор мало знакомы с детерминантами, то не следите за доказательством и прямо переходите к определению (4.15).]

Во-первых, следует напомнить, что (4.11) — это математическое определение «произведения» двух матриц. (Просто очень удобно говорить « R^{US} есть произведение R^{UT} и R^{TS} ».) Во-вторых, существует математическая теорема (которую для используемых здесь матриц 2×2 вы легко докажете), утверждающая, что детерминант «произведения» двух матриц есть произведение их детерминантов. Применив эту теорему к (4.12), получим

$$e^{i\hat{\omega}} (\text{Det } R^{US}) = (\text{Det } R^{UT}) (\text{Det } R^{TS}). \quad (4.13)$$

(Мы отбрасываем нижние индексы, они здесь ничего полезного нам не сообщают.) Да, слева стоит $2\delta!$ Вспомните, что мы имеем дело с матрицами 2×2 ; каждый член в матрице R_{ki}^{US} умножен на $e^{i\hat{\omega}}$, а каждый член в детерминанте (состоящий из двух множителей) получается умножением на $e^{i\hat{\omega}}$. Извлечем из (4.13) корень и разделим на него (4.12):

$$\frac{R_{ki}^{US}}{\sqrt{\text{Det } R^{US}}} = \sum_i \frac{R_{kj}^{UT}}{\sqrt{\text{Det } R^{UT}}} \frac{R_{ji}^{TS}}{\sqrt{\text{Det } R^{TS}}}. \quad (4.14)$$

Добавочный фазовый множитель исчез.

Дальше оказывается, что если мы хотим, чтобы все наши амплитуды в любом заданном представлении были нормированы (а это, как вы помните, означает, что $\sum_i \langle \phi | i \rangle \langle i | \phi \rangle = 1$), то у всех матриц поворота детерминанты окажутся чисто мнимыми экспонентами, наподобие $e^{i\hat{\omega}}$. (Мы не будем этого доказывать; вы сами потом увидите, что это всегда так.) Значит, мы сможем, если захотим, выбрать все наши матрицы поворота R так, чтобы фаза их получалась однозначно, взяв $\text{Det } R = 1$. Это будет делаться так. Пусть мы каким-то произвольным образом определили матрицу поворота R . Возьмем за правило «приводить» ее к «стандартной форме», определяя

$$R_{\text{станд}} = \frac{R}{\sqrt{\text{Det } R}}. \quad (4.15)$$

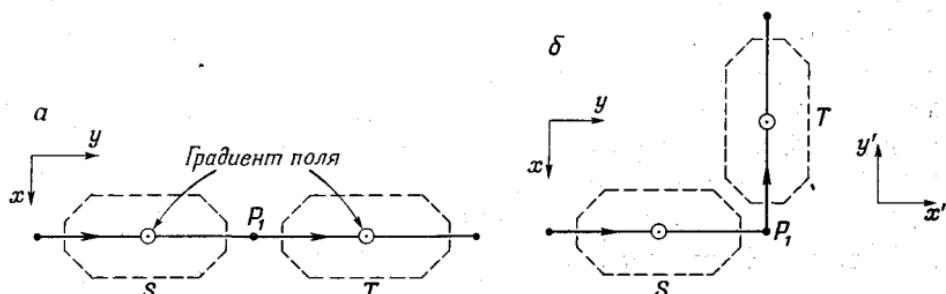
Для получения однозначных фаз мы просто умножаем каждый член в R на один и тот же фазовый множитель. В дальнейшем мы будем всегда предполагать, что наши матрицы были приведены к «стандартной форме»; тогда мы сможем пользоваться прямо формулой (4.11) без каких-либо добавочных фазовых множителей.

§ 3. Повороты вокруг оси z

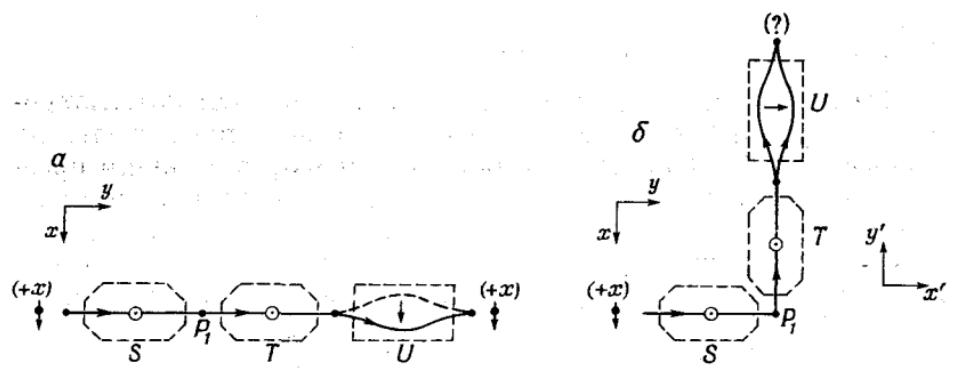
Теперь мы уже подготовлены к тому, чтобы отыскать матрицу преобразования R_{ji} , связывающую два разных представления. Владея нашим правилом объединения поворотов и нашим предположением, что в пространстве нет предпочтительного направления, мы владеем ключом для отыскания матрицы любого произвольного поворота. Решение здесь только *одно*. Начнем с преобразования, которое отвечает повороту вокруг оси z . Пусть имеются два прибора S и T , поставленных друг за другом вдоль одной прямой; оси их параллельны и смотрят из страницы на вас (фиг. 4.4, *a*). Это их направление мы примем за ось z . Ясно, что если пучок в приборе S идет вверх ($+z$), то то же будет и в аппарате T . Точно так же, если он в S идет вниз, то и в T он направится вниз. Положим, однако, что прибор T был повернут на какой-то угол, но его ось, как и прежде, параллельна оси прибора S , как на фиг. 4.4, *b*. Интуитивно хочется сказать, что пучок (+) в S будет по-прежнему переходить в пучок (+) в T , потому что и поля, и их градиенты характеризуются тем же физическим направлением. И это вполне правильно. Точно так же и пучок (-) в S будет переходить в пучок (-) в T . Тот же результат применим для любой ориентации T в плоскости xy прибора S . Что же отсюда следует для связи между $C'_+ = \langle +T | \psi \rangle$, $C'_- = \langle -T | \psi \rangle$ и $C_+ = \langle +S | \psi \rangle$, $C_- = \langle -S | \psi \rangle$? Можно подумать, что любой поворот вокруг оси z «системы отсчета» базисных состояний оставляет амплитуды C_\pm пребывания «вверху» и «внизу» теми же, что и раньше, и написать $C'_+ = C_+$ и $C'_- = C_-$. Но это *неверно*. Все, что можно отсюда заключить, — это, что при таких поворотах вероятности оказаться в «верхнем» пучке приборов S и T одинаковы, т. е.

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

Но мы не вправе утверждать, что *фазы* амплитуд, относящихся к прибору T , не могут в двух различных ориентациях *a* и *b* (фиг. 4.4) различаться.



Фиг. 4.4. Поворот на 90° вокруг оси z .



Фиг. 4.5. Частица в состоянии $(+x)$ ведет себя в опытах а и б по-разному.

Пары приборов, показанных на фиг. 4.4, на самом деле отличаются друг от друга, в чем можно убедиться следующим образом. Предположим, что мы перед прибором S поставили другой, создающий чистое $(+x)$ -состояние. (Ось x направлена на рисунке вниз.) Эти частицы расщеплялись бы в S на пучки $(+z)$ и $(-z)$, но на выходе S (в точке P_1) оба пучка снова соединялись бы и восстанавливали состояние $(+x)$. Затем то же самое происходило бы в T . Если бы за T поставить третий прибор U , ось которого направлена по $(+x)$, как показано на фиг. 4.5, а, то все частицы пошли бы в пучок $(+)$ прибора U . Теперь представим, что произойдет, если T и U вместе повернуть на 90° , как показано на фиг. 4.5, б. Прибор T опять будет пропускать все, что в него поступает, так что частицы, входящие в U , будут в $(+x)$ -состоянии по отношению к S . Но U теперь анализирует состояние $(+y)$ (по отношению к S), а это совсем не то, что раньше. (Из симметрии следует ожидать, что через него пройдет только половина частиц.)

Что же могло перемениться? Приборы T и U по отношению друг к другу расположены одинаково. Могла ли измениться физика просто из-за того, что T и U иначе ориентированы? Нет, гласит наше первоначальное предположение. Значит, различаться в двух случаях, показанных на фиг. 4.5, должны *амплитуды* по отношению к T . То же должно быть, следовательно, и на фиг. 4.4. Частица должна как-то уметь узнавать, что в P_1 она завернула за угол. Как же она может об этом поведать? Что ж, остается только одно: *величины* C'_+ и C'_- в обоих случаях одинаковы, но могут — а на самом деле должны — обладать разными *фазами*. Мы приходим к заключению, что C'_+ и C'_- должны быть связаны формулой

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

а C'_- и C_- — формулой

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

где λ и μ — вещественные числа, которые как-то должны быть связаны с углом между S и T .

В данный момент единственное, что мы можем сказать про λ и μ , — это то, что они не могут быть равны друг другу (кроме показанного на фиг. 4.5, *a* особого случая, когда T и S ориентированы одинаково). Мы видели, что изменение всех амплитуд на одну и ту же фазу никаким физическим следствиям не приводит. По той же причине всегда можно добавить к λ и μ любое постоянное число — это тоже ничего не изменит. Значит, нам представляется возможность выбрать λ и μ равными плюс и минус одному и тому же числу. Всегда можно взять

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

Тогда

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

Итак, мы договоримся * считать $\mu = -\lambda$ и приедем к общему правилу, что поворот прибора, относительно которого ведется отсчет, вокруг оси z на какой-то угол приводит к преобразованию

$$C'_+ = e^{+i\lambda} C_+, \quad C'_- = e^{-i\lambda} C_-. \quad (4.16)$$

Абсолютные значения одинаковы, а фазы различны. Эти-то фазовые множители и отвечают за различные результаты двух опытов, показанных на фиг. 4.5.

Теперь надо узнать закон, связывающий λ с углом между S и T . Для одного случая ответ известен. Если угол — нуль, то и λ — нуль. Теперь предположим, что фазовый сдвиг λ есть непрерывная функция угла ϕ между S и T (см. фиг. 4.4) при ϕ , стремящемся к нулю. По-видимому, это единственное разумное допущение. Иными словами, если свернуть T с прямой линии S на малый угол ε , то и λ тоже будет малым числом, скажем $m\varepsilon$, где m — некоторый коэффициент. Мы пишем $m\varepsilon$, потому что можем доказать, что λ обязано быть пропорционально ε . Если бы мы поставили за T новый прибор T' , тоже образующий с T угол ε , а с S тем самым образующий угол 2ε , то по отношению к T мы бы имели

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

а по отношению к T'

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

* Можно посмотреть на это и иначе. Мы просто производим преобразование к «стандартной форме», описанное в § 2, используя формулу (4.15).

Но мы знаем, что должны были бы получить тот же результат если бы сразу за S поставили T' ! Значит, когда угол удваивается, то удваивается и фаза. Эти аргументы мы можем, естественно, обобщить и построить любой поворот из последовательных бесконечно малых поворотов. Мы заключаем, что λ пропорционально ϕ для любого угла ϕ . Поэтому всегда можно писать $\lambda = m\phi$.

Общий полученный нами результат состоит, следовательно, в том, что для T , повернутого вокруг оси z относительно S на угол ϕ ,

$$C'_+ = e^{im_2\phi} C_+, \quad C'_- = e^{-im_2\phi} C_-. \quad (4.17)$$

Для угла ϕ и для всех поворотов, которые встретятся нам в будущем, мы условимся считать, что *положительным* поворотом будет поворот правого винта, который ввинчивается в положительном направлении z .

Теперь остается узнать, каким должно быть m . Попробуем сперва следующее рассуждение: пусть T повернулся на 360° ; ясно, что тогда он опять очутится под нулем градусов, и мы должны будем иметь $C'_+ = C_+$ и $C'_- = C_-$, или, что то же самое, $e^{im_2\pi} = 1$. Мы получаем $m = 1$. *Это рассуждение не годится!*

Чтобы убедиться в этом, допустим, что T повернут на 180° . Если бы m было равно единице, мы получили бы $C'_+ = e^{i\pi} C_+ = -C_+$ и $C'_- = e^{-i\pi} C_- = -C_-$. Но это просто опять получилось *первоначальное* состояние. Обе амплитуды просто умножены на -1 ; это возвращает нас к исходной физической системе. (Опять случай всеобщей перемены фаз.) Это означает, что если угол между T и S на фиг. 4.5, б увеличивается на 180° , то система (по отношению к T) оказывается неотличимой от случая 0° и частицы опять проходит через состояние (+) прибора U . Но при 180° состояние (+) прибора U — это состояние ($-x$) начального прибора S . Так что состояние ($+x$) станет состоянием ($-x$). Но мы-то ведь ничего не делали для изменения начального состояния; ответ поэтому ошибочен. Не может быть, чтобы $m = 1$.

Нет, все должно быть иначе: надо, чтобы только поворот на 360° (*и ни на какие меньшие углы*) воспроизводил то же самое физическое состояние. Это случится при $m = 1/2$. Тогда и только тогда первым углом, воспроизводящим то же самое физическое состояние, будет угол $\phi = 360^\circ$ *. При этом будет

$$\left. \begin{array}{l} C'_+ = -C_+ \\ C'_- = -C_- \end{array} \right\} \text{на } 360^\circ \text{ вокруг оси } z. \quad (4.18)$$

* Конечно, подошло бы и $m = -1/2$. Однако из (4.17) ясно, что изменение знака просто переопределит понятие «спин вверх».

Очень курьезно вдруг обнаружить, что поворот прибора на 360° приводит к новым амплитудам. Но на самом деле они не новы, потому что одновременная перемена знака ни к какой новой физике не приводит. Если кто-нибудь задумает переменить все знаки у всех амплитуд, подумав, что он повернулся на 360° , то это его дело — физику он получит ту же, прежнюю*. Итак, наш окончательный ответ таков: если мы знаем амплитуды C_+ и C_- для частиц со спином $1/2$ по отношению к системе отсчета S и если затем мы используем базисную систему, связанную с T (T получается из S поворотом на φ относительно оси z), то новые амплитуды выражаются через старые так:

$$\left. \begin{aligned} C'_+ &= e^{i\varphi/2} C_+ \\ C'_- &= e^{-i\varphi/2} C_- \end{aligned} \right\} \text{на угол } \varphi \text{ вокруг оси } z. \quad (4.19)$$

§ 4. Повороты на 180° и на 90° вокруг оси y

Теперь попробуем подобрать преобразование для поворота T (по отношению к S) на 180° вокруг оси, *перпендикулярной* к оси z , скажем вокруг оси y . (Оси координат мы определили на фиг. 4.1.) Иными словами, берутся два одинаковых прибора Штерна — Герлаха и второй из них, T , переворачивается относительно первого, S , «вверх ногами» (фиг. 4.6). Если рассматривать частицы как маленькие магнитные диполи, то частица, которая находится в состоянии $(+S)$ (в первом приборе она избирает «верхний» путь), и во втором приборе избирает «верхний» путь, т. е. окажется по отношению к T в *минус*-состоянии. (В перевернутом приборе T переворачиваются и поле, и направление его градиента; для частицы с заданным направлением магнитного момента сила не меняется.) То, что для S было «верхом», то для T будет «низом». Для такого относительного расположения S и T преобразования, естественно, должны дать

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

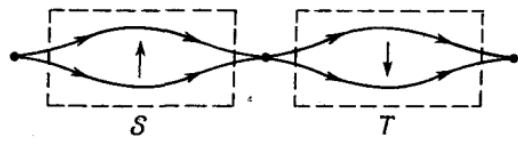
Как и раньше, нельзя исключить добавочные фазовые множители; на самом деле может оказаться, что

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

где β и γ еще подлежат определению.

А что можно сказать о повороте вокруг оси y на угол 360° ? Мы уже знаем ответ для поворота на 360° вокруг оси z : амплитуда пребывания в любом состоянии меняет знак. Повороты на 360° вокруг любой оси всегда приводят прибор в прежнее положение.

* Заметим, что если последовательность малых поворотов приведет в конце концов к первоначальной ориентации предмета, то всегда есть возможность, проследив всю историю, отличить поворот на 360° от поворота на 0° (но интересно, что для поворота на 720° это *неверно*).



Фиг. 4.6. Поворот на 180° вокруг оси y .

жение. Таким образом, результат любого поворота на 360° должен быть таким же, как и при повороте на 360° вокруг оси z , — все амплитуды должны просто переменить знак. Теперь представим себе два последовательных поворота на 180° вокруг оси y по формуле (4.20); после них должен получиться результат (4.18). Иными словами,

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

и

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

Это означает, что

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

Следовательно, $\gamma = -\beta + \pi$, и преобразование для поворота на 180° вокруг оси y может быть записано так:

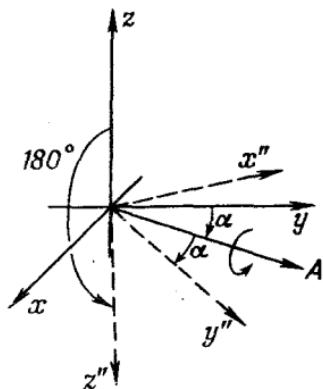
$$C'_+ = e^{i\beta} C_- , \quad C'_- = -e^{-i\beta} C_+ . \quad (4.22)$$

Рассуждения, которыми мы только что пользовались, в равной степени применимы к поворотам на 180° вокруг любой оси в плоскости xy , хотя, конечно, повороты вокруг разных осей дадут для β разные числа. Но это единственное, чем они могут отличаться. В числе β имеется известный произвол, но, как только оно определено для какой-то одной оси в плоскости xy , оно определяется и для всех прочих осей. Принято выбирать $\beta = 0$ для поворотов на 180° вокруг оси y .

Чтобы показать, что свобода такого выбора у нас есть, предположим, что мы решили, что β не равно нулю для поворота вокруг оси y ; тогда можно показать, что в плоскости xy существует *какая-то другая ось*, для которой соответствующая фаза будет нулем. Найдем фазовый множитель β_A для оси A , образующей с осью y угол α , как показано на фиг. 4.7, а. (Для удобства на рисунке угол α отрицателен, но это неважно.) Если теперь мы возьмем прибор T , первоначально направленный так же, как и S , а потом повернем его вокруг оси A на 180° , то его оси — назовем их x'', y'', z'' — расположатся так,

Фиг. 4.7. Поворот на 180° вокруг оси A (а) эквивалентен повороту на 180° вокруг оси y (б), за которым следует поворот вокруг оси z' (в).

а

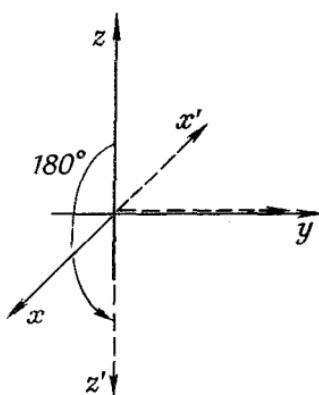


как на фиг. 4.7, а. Амплитуды по отношению к T тогда станут

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

$$C''_- = -e^{-i\beta_A} C_+.$$

б

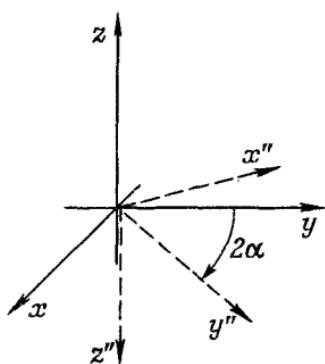


Но той же самой ориентации можно добиться двумя последовательными поворотами, показанными на фиг. 4.7, б и в. Возьмем сначала прибор U , повернутый по отношению к S на 180° вокруг оси y . Оси x' , y' и z' прибора U будут такими, как на фиг. 4.7, б, а амплитуды по отношению к U будут даваться формулой (4.22).

Заметьте теперь, что от U к T можно перейти, повернув прибор U вокруг «оси z' », т. е. вокруг z' , как показано на фиг. 4.7, в. Из рисунка видно, что требуемый угол вдвое больше угла α , но направлен в обратную сторону (по отношению к z'). Используя преобразование (4.19) с $\varphi = -2\alpha$, получаем

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

в



Подставляя (4.22) в (4.24), получаем

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

Эти амплитуды, конечно, должны совпасть с полученными в (4.23). Значит, β_A должно быть связано с α и β формулой

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

Это означает, что если угол α между осью A и осью y (прибо-

ра S) равен β , то в преобразовании поворота на 180° вокруг оси A будет стоять $\beta_A = 0$.

Но коль скоро у *какой-то* из осей, перпендикулярных к оси z , может оказаться $\beta = 0$, то ничто не мешает принять эту ось за ось y . Это всего лишь вопрос *соглашения*, и мы примем это в общем случае. *Итог:* для поворота на 180° вокруг оси y мы имеем

$$\left. \begin{array}{l} C'_+ = C_- \\ C'_- = -C_+ \end{array} \right\} \text{на } 180^\circ \text{ вокруг оси } y. \quad (4.27)$$

Продолжая размышлять о поворотах вокруг оси y , перейдем теперь к матрице преобразования для поворотов на 90° . Мы в состоянии установить ее вид, оттого что знаем, что два последовательных поворота на 90° вокруг одной и той же оси — это то же самое, что один поворот на 180° . Напишем преобразование для 90° в самой общей форме:

$$C'_+ = aC_+ + bC_-, \quad C'_- = cC_+ + dC_-. \quad (4.28)$$

Второй поворот на 90° вокруг той же оси обладал бы теми же коэффициентами:

$$C''_+ = aC'_+ + bC'_-, \quad C''_- = cC'_+ + dC'_-. \quad (4.29)$$

Подставляя (4.28) в (4.29), получаем

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

Однако из (4.27) нам известно, что

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

так что должно быть

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

Этих четырех уравнений вполне хватает, чтобы определить все наши неизвестные a , b , c и d . Сделать это нетрудно. Посмотрите на второе и четвертое уравнения. Вы видите, что $a^2 = d^2$, откуда либо $a = d$, либо $a = -d$. Но последнее отпадает, потому что тогда не выполнялось бы первое уравнение. Значит, $d = a$. А тогда сразу же выходит $b = 1/2a$ и $c = -1/2a$. Теперь все выражено через a . Подставляя, скажем, во второе

уравнение значения b и c , получаем

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

Из четырех решений этого уравнения только два приводят к детерминанту стандартной формы. Мы можем принять $a=1/\sqrt{2}$; тогда *

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

Иными словами, для двух приборов S и T при условии, что T повернут относительно S на 90° вокруг оси y , преобразование имеет вид

$$\left. \begin{aligned} C'_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (C_+ + C_-) \\ C'_- &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-C_+ + C_-) \end{aligned} \right\} \text{на } 90^\circ \text{ вокруг оси } y. \quad (4.32)$$

Эти уравнения можно, конечно, разрешить относительно C_+ и C_- ; это даст нам преобразование при повороте вокруг оси y на -90° . Переставив еще и штрихи, мы напишем

$$\left. \begin{aligned} C'_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (C_+ - C_-) \\ C'_- &= \frac{1}{\sqrt{2}} (C_+ + C_-) \end{aligned} \right\} \text{на } -90^\circ \text{ вокруг оси } y. \quad (4.33)$$

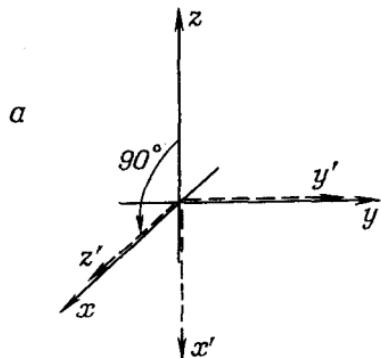
§ 5. Повороты вокруг оси x

Вы, пожалуй, подумаете: «Это становится смешным. Чему же нас теперь будут учить — поворотам на 47° вокруг оси y , потом на 33° вокруг x ? Долго ли это будет продолжаться?» Нет, оказывается, я почти все рассказал. Зная только два преобразования — на 90° вокруг оси y и на произвольный угол вокруг оси z (как вы помните, именно с этого мы начали), — мы уже способны производить любые повороты.

Для иллюстрации предположим, что нас интересует поворот на угол α вокруг оси x . Мы знаем, как быть с поворотом на угол α вокруг оси z , но нам нужен поворот вокруг оси x . Как его определить? Сперва повернем ось z вниз до оси x , а это есть поворот на $+90^\circ$ вокруг оси y (фиг. 4.8). Затем вокруг оси z' повернемся на угол α . А потом повернемся на -90° .

* Второе решение меняет все знаки у a , b , c , d и отвечает повороту на -270° .

Фиг. 4.8. Поворот на угол α вокруг оси x равнозначен повороту на $+90^\circ$ вокруг оси y (а), за которым следует поворот на α вокруг оси z' (б), вслед за которым происходит поворот на -90° вокруг оси y'' (в).



вокруг оси y'' . Итог этих трех поворотов тот же самый, что при повороте вокруг оси x на угол α . Таково свойство пространства.

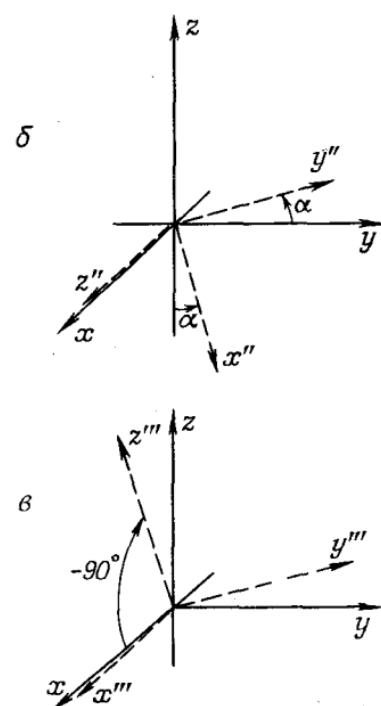
(Все эти сочетания поворотов и их результат очень трудно себе представить. Не правда ли, странно, что, живя в трех измерениях, мы все же с трудом воспринимаем, что произойдет, если сперва повернуться так, а потом еще какнибудь. Вероятно, если бы мы были птицами или рыбами и если бы мы на собственном опыте знали, что бывает, когда все время крутишь разные сальто в пространстве, нам было бы легче воспринимать подобные вещи.)

Во всяком случае, давайте выведем преобразование для поворота на угол α вокруг оси x , пользуясь тем, что нам уже известно. При первом повороте на $+90^\circ$ вокруг оси y амплитуды следуют закону (4.32). Если повернутые оси обозначить x' , y' и z' , то последующий поворот на угол α вокруг оси z' переводит нас в систему отсчета x'' , y'' , z'' , для которой

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

Последний поворот на -90° вокруг оси y'' переводит нас в систему x''' , y''' , z''' ; из (4.33) следует

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



Сочетая эти два последних преобразования, получаем

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

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

Подставляя сюда вместо C'_+ и C'_- (4.32), придем к полному преобразованию

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

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

А если вспомнить, что

$$e^{i\theta} + e^{-i\theta} = 2 \cos \theta \quad \text{и} \quad e^{i\theta} - e^{-i\theta} = 2i \sin \theta,$$

то эти формулы можно записать проще:

$$\left. \begin{aligned} C_+''' &= \left(\cos \frac{\alpha}{2} \right) C_+ + i \left(\sin \frac{\alpha}{2} \right) C_- \\ C_-''' &= i \left(\sin \frac{\alpha}{2} \right) C_+ + \left(\cos \frac{\alpha}{2} \right) C_- \end{aligned} \right\} \text{на угол } \alpha \text{ вокруг оси } x. \quad (4.34)$$

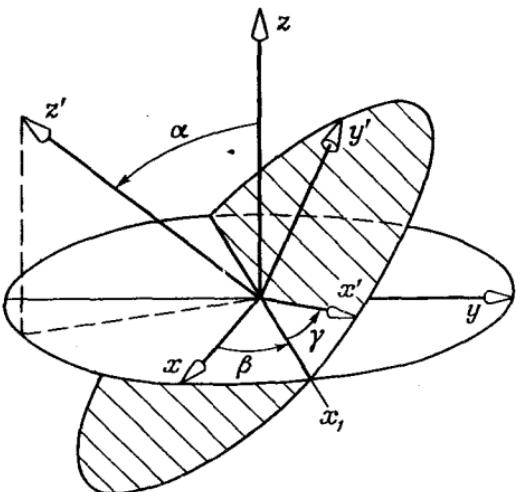
Это и есть наше искомое преобразование для поворота вокруг оси x на любой угол α . Оно лишь чуть посложнее остальных.

§ 6. Произвольные повороты

Теперь уже понятно, как быть с *произвольным* поворотом. Во-первых, заметьте, что любая относительная ориентация двух систем координат может быть описана тремя углами (фиг. 4.9). Если есть система осей x' , y' , z' , ориентированных относительно x , y , z как угодно, то соотношение между ними можно описать тремя углами Эйлера α , β и γ , определяющими три последовательных поворота, которые переводят систему x , y , z в систему x' , y' , z' . Отправляясь от x , y , z , мы поворачиваем нашу систему на угол β вокруг оси z , перенося ось x на линию x' . Затем мы проводим поворот на угол α вокруг этой временной оси x_1 , чтобы довести ось z до z' . Наконец, поворот вокруг новой оси z (т. е. вокруг z') на угол γ переведет ось x_1 в x' , а ось y в y'^* . Мы знаем преобразования для каждого из трех поворотов — они даются формулами (4.19) и

* Нетрудно показать, что систему x , y , z можно перевести в систему x' , y' , z' следующими тремя поворотами вокруг *первоначальных* осей: 1) повернуть на угол γ вокруг первоначальной оси z ; 2) повернуть на угол α вокруг первоначальной оси x ; 3) повернуть на угол β вокруг первоначальной оси z .

Фиг. 4.9. Ориентацию любой системы координат x' , y' , z' по отношению к другой системе x , y , z можно определить с помощью углов Эйлера α , β , γ .

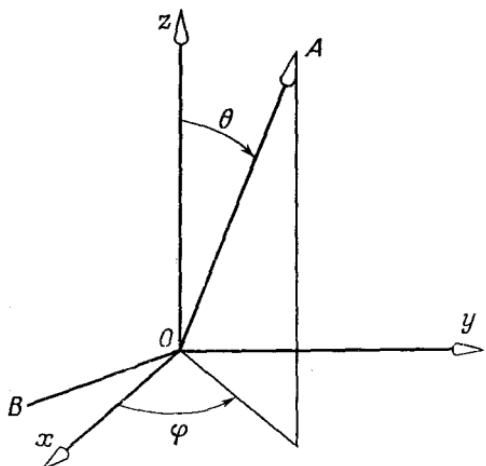


(4.34). Комбинируя их в нужном порядке, получаем

$$\begin{aligned} C'_+ &= \cos \frac{\alpha}{2} e^{i(\beta+\gamma)/2} C_+ + i \sin \frac{\alpha}{2} e^{-i(\beta-\gamma)/2} C_-, \\ C'_- &= i \sin \frac{\alpha}{2} e^{i(\beta-\gamma)/2} C_+ + \cos \frac{\alpha}{2} e^{-i(\beta+\gamma)/2} C_-. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Итак, начав просто с некоторых предположений о свойствах пространства, мы вывели преобразование амплитуды при любом повороте. Это означает, что если нам известны амплитуды того, что любое состояние частицы со спином $1/2$ перейдет в один из двух пучков прибора Штерна — Герлаха S с осями x , y , z , то мы можем подсчитать, какая часть перейдет в каждый пучок в приборе T с осями x' , y' и z' . Иначе говоря, если имеется состояние ψ частицы со спином $1/2$, у которого амплитуды пребывания вверху и внизу по отношению к оси z системы координат x , y , z равны $C_+ = \langle + | \psi \rangle$ и $C_- = \langle - | \psi \rangle$, то тем самым мы знаем амплитуды C'_+ и C'_- пребывания вверху и внизу по отношению к оси z' любой другой системы x' , y' , z' . Четверка коэффициентов в (4.35) — это члены «матрицы преобразования», с помощью которой можно проецировать амплитуды частицы со спином $1/2$ в другие системы координат.

Теперь решим несколько примеров, чтобы посмотреть, как все это работает. Возьмем следующий простой вопрос. Пустим атом со спином $1/2$ через прибор Штерна — Герлаха, пропускающий только состояние $(+z)$. Какова амплитуда того, что атом окажется в состоянии $(+x)$? Ось $+x$ — это все равно, что ось $+z'$ системы, повернутой на 90° вокруг оси y . Поэтому в этой задаче проще воспользоваться выражением (4.32), хотя,



Фиг. 4.10. Ось A , определяемая полярными углами θ и ϕ .

конечно, можно применить и полное уравнение (4.35). Поскольку $C_+ = 1$ и $C_- = 0$, то получится $C_+ = 1/\sqrt{2}$. Вероятности — это квадраты модулей этих амплитуд; таким образом, 50% шансов за то, что частица пройдет сквозь прибор, отбирающий состояние $(+x)$. Если бы мы поинтересовались состоянием $(-x)$, то амплитуда оказалась бы $-1/\sqrt{2}$, что опять дало бы вероятность $1/2$, чего и следовало ожидать из симметрии пространства. Итак, если частица находится в состоянии $(+z)$, то ей в равной степени вероятно побывать в состояниях $(+x)$ и $(-x)$. Но фазы противоположны.

Ось y тоже без претензий. Частица в состоянии $(+z)$ имеет равные шансы быть в состоянии $(+y)$ или $(-y)$. Но теперь (согласно формуле для поворота на -90° вокруг оси x) амплитуды суть $1/\sqrt{2}$ и $-i/\sqrt{2}$. В этом случае разница в фазах двух амплитуд уже не 180° , как было для $(+x)$ и $(-x)$, а 90° . В этом-то и проявляется различие между x и y .

Вот еще пример. Пусть нам известно, что частица со спином $1/2$ находится в состоянии ψ , поляризованном вверх относительно оси A , определяемой углами θ и ϕ (фиг. 4.10). Мы хотим знать амплитуду $\langle C_+ | \psi \rangle$ того, что частица относительно оси z окажется в состоянии «вверх», и амплитуду $\langle C_- | \psi \rangle$ того, что она окажется в состоянии «вниз» относительно той же оси z . Эти амплитуды мы можем найти, вообразив, что A есть ось z' системы, у которой ось x' направлена произвольно, скажем лежит в плоскости, образованной A и z . Тогда можно перевести систему A в систему x, y, z тремя поворотами. Во-первых, надо сделать поворот на $-\pi/2$ вокруг оси A , что переведет ось x в линию B на рисунке. Затем повернуть на $-\theta$ вокруг линии B (вокруг новой оси x' системы A), чтобы ось A попала на ось z . И, наконец, повернуть вокруг оси z на угол $(\pi/2 - \phi)$.

Таблица 4.1 АМПЛИТУДЫ $\langle jT | iS \rangle$ ДЛЯ ПОВОРОТА,
ОПРЕДЕЛЯЕМОГО УГЛАМИ ЭЙЛЕРА α, β, γ
(ФИГ. 4.9)

$\langle jT iS \rangle$	$+S$	$-S$
$+T$	$\cos \frac{\alpha}{2} e^{i(\beta+\gamma)/2}$	$i \sin \frac{\alpha}{2} e^{-i(\beta-\gamma)/2}$
$-T$	$i \sin \frac{\alpha}{2} e^{i(\beta-\gamma)/2}$	$\cos \frac{\alpha}{2} e^{-i(\beta+\gamma)/2}$

Таблица 4.2 АМПЛИТУДЫ $\langle jT | iS \rangle$ ДЛЯ ПОВОРОТА $R(\varphi)$
НА УГОЛ φ ВОКРУГ ОДНОЙ ИЗ ОСЕЙ

$R_z(\varphi)$		
$\langle jT iS \rangle$	$+S$	$-S$
$+T$	$e^{i\varphi/2}$	0
$-T$	0	$e^{-i\varphi/2}$

$R_x(\varphi)$		
$\langle jT iS \rangle$	$+S$	$-S$
$+T$	$\cos \frac{\varphi}{2}$	$i \sin \frac{\varphi}{2}$
$-T$	$i \sin \frac{\varphi}{2}$	$\cos \frac{\varphi}{2}$

$R_y(\varphi)$		
$\langle jT iS \rangle$	$+S$	$-S$
$+T$	$\cos \frac{\varphi}{2}$	$\sin \frac{\varphi}{2}$
$-T$	$-\sin \frac{\varphi}{2}$	$\cos \frac{\varphi}{2}$

Вспоминая, что вначале было только одно состояние (+) по отношению к A , получаем

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

Мы хотели бы напоследок подытожить результаты этой главы в форме, которая окажется полезной для нашей дальнейшей работы. Во-первых, напомним, что наш основной результат (4.35) может быть записан в других обозначениях. Заметьте, что (4.35) — это то же самое, что и (4.4). Иначе говоря, в (4.35) коэффициенты при $C_+ = \langle +S|\psi \rangle$ и $C_- = \langle -S|\psi \rangle$ суть как раз амплитуды $\langle jT|iS \rangle$ в (4.4), амплитуды того, что частица в состоянии i по отношению к S окажется в состоянии j по отношению к T (когда ориентация T по отношению к S дается углами α, β и γ). Мы их также называли R_{ji}^{TS} в выражении (4.6). (Чего-чего, а обозначений у нас хватало!) Например, $R_{-+}^{TS} = \langle -T|+S \rangle$ — это коэффициент при C_+ в формуле для C_-' , а именно $i \sin(\alpha/2) \exp[i(\beta-\gamma)/2]$. Поэтому сводку наших результатов мы можем дать в виде табл. 4.1.

Было бы удобно иметь эти амплитуды расписанными для некоторых особо важных случаев. Пусть $R_z(\varphi)$ — поворот на угол φ вокруг оси z . Так же можно обозначить и соответствующую матрицу поворота (опуская молчаливо подразумеваемые индексы i и j). В том же смысле $R_x(\varphi)$ и $R_y(\varphi)$ будут обозначать повороты на угол φ вокруг оси x и оси y .

В табл. 4.2 мы приводим матрицы — таблицы амплитуд $\langle jT| iS \rangle$, которые проецируют амплитуды из системы S в систему T , где T получается из S указанным поворотом.

ЗАВИСИМОСТЬ АМПЛИТУД ОТ ВРЕМЕНИ

§ 1. Покоящиеся атомы; стационарные состояния

Мы хотим теперь немного рассказать о том, как ведут себя амплитуды вероятности во времени. Мы говорим «немного», потому что на самом деле поведение во времени с необходимостью включает в себя и поведение в пространстве. Значит, пожелав описать поведение со всей корректностью и детальностью, мы немедленно очутимся в весьма сложном положении. Перед нами возникает наша всегдашняя трудность — то ли изучать нечто строго логически, но абсолютно абстрактно, то ли не думать о строгости, а давать какое-то представление об истинном положении вещей, откладывая более тщательное исследование на позже. Сейчас, говоря о зависимости амплитуд от энергии, мы намерены избрать второй способ. Будет высказан ряд утверждений. При этом мы не будем стремиться к строгости, а просто расскажем вам о том, что было обнаружено, чтобы вы смогли почувствовать, как ведут себя амплитуды во времени. По мере хода нашего изложения точность описания будет возрастать, так что, пожалуйста, не нервничайте, видя, как фокусник будет извлекать откуда-то из воздуха разные вещи. Они и впрямь берутся из чего-то неосвязанного — из духа эксперимента и из воображения многих людей. Но проходить все стадии исторического развития предмета — дело очень долгое, кое-что придется просто пропустить. Можно было бы погрузиться в абстракции и все строго выводить (но вы вряд ли бы это поняли) или пройти через множество экспериментов, подтверждая ими каждое свое утверждение. Мы выберем что-то среднее.

§ 1. Покоящиеся
атомы; стацио-
нарные состояния

§ 2. Равномерное дви-
жение

§ 3. Потенциальная
энергия; сохране-
ние энергии

§ 4. Силы; классиче-
ский предел

§ 5. «Прецессия» ча-
стицы со спином
 $\frac{1}{2}$

Дополнительные главы: гл. 17
(вып. 2) «Про-
странство-время»;
гл. 48 (вып. 4)
«Биения»

Одиночный электрон в пустом пространстве может при некоторых условиях обладать вполне определенной энергией. Например, если он покоится (т. е. не обладает ни перемещательным движением, ни импульсом, ни кинетической энергией), то у него есть энергия покоя. Объект посложнее, например атом, тоже может, покоясь, обладать определенной энергией, но он может оказаться и внутренне возбужденным — возбужденным до другого уровня энергии. (Механизм этого мы опишем позже.) Часто мы вправе считать, что атом в возбужденном состоянии обладает определенной энергией; впрочем, на самом деле это верно только приближенно. Атом не остается возбужденным навечно, потому что он всегда стремится разрядить свою энергию, взаимодействуя с электромагнитным полем. Так что всегда есть некоторая амплитуда того, что возникнет новое состояние — с атомом в низшем состоянии возбуждения и электромагнитным полем в высшем. Полная энергия системы и до, и после — одна и та же, но энергия *атома* уменьшается. Так что не очень точно говорить, что у возбужденного атома есть *определенная* энергия; но часто так говорить удобно и не очень неправильно.

[Кстати, почему все течет в одну сторону и не течет в другую? Отчего атом излучает свет? Ответ связан с энтропией. Когда энергия находится в электромагнитном поле, то перед ней открывается столько разных путей — столько разных мест, куда она может попасть, — что, отыскивая условие равновесия, мы убеждаемся, что в самом вероятном положении поле оказывается возбужденным одним фотоном, а атом — невозбужденным. И фотону требуется немалое время, чтобы возвратиться и обнаружить, что он может возбудить атом обратно. Это полностью аналогично классической задаче: почему ускоряемый заряд излучает? Не потому, что он «хочет» утратить энергию, нет, ведь на самом-то деле, когда он излучает, энергия мира остается такой же, как и прежде. Просто излучение или поглощение всегда идет в направлении роста *энтропии*.]

Ядра тоже могут существовать на разных энергетических уровнях, и в том приближении, когда пренебрегают электромагнитными эффектами, мы вправе говорить, что ядро в возбужденном состоянии таким и остается. Хотя мы и знаем, что оно не останется таким навсегда, часто бывает полезно исходить из несколько идеализированного приближения, которое проще рассмотреть. К тому же в некоторых обстоятельствах — это узаконенное приближение. (Когда мы впервые вводили классические законы падения тел, мы не учитывали трения, а ведь почти не бывает так, чтобы трения *вовсе* не было.)

Кроме того, существуют еще «странные частицы» с различными массами. Но более массивные из них распадаются на более легкие, так что опять неправильно будет говорить, будто

их энергия точно определена. Это было бы верно, если бы они сохранялись навечно. Так что когда мы приближенно считаем их обладающими определенной энергией, то забываем при этом, что они должны распасться. Но сейчас мы нарочно забудем про такие процессы, а после, со временем, выучимся принимать во внимание и их.

Пусть имеется атом (или электрон, или любая частица), обладающий в состоянии покоя определенной энергией E_0 . Под энергией E_0 мы подразумеваем массу всего этого, умноженную на c^2 . В массу входит любая внутренняя энергия; стало быть, масса возбужденного атома отличается от массы того же атома, но в основном состоянии. (Основное состояние означает состояние с наименьшей энергией.) Назовем E_0 «энергией покоя».

Для атома, находящегося в состоянии покоя, квантовомеханическая амплитуда обнаружить его в каком-то месте *всюду одна и та же*; от положения она *не зависит*. Это, разумеется, означает, что *вероятность обнаружить* атом в любом месте — одна и та же. Но это означает даже большее. *Вероятность* могла бы не зависеть от положения, а *фаза амплитуды* при этом могла бы еще меняться от точки к точке. Но для частицы в покое полная амплитуда *всюду одинакова*. Однако она зависит от *времени*. Для частицы в состоянии определенной энергии E_0 амплитуда обнаружить частицу в точке (x, y, z) в момент t равна

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

где a — некоторая постоянная. Амплитуда пребывания в такой-то точке пространства для всех точек одинакова, но зато зависит от времени согласно (5.1). Мы просто допустим, что это правило верно всегда.

Можно, конечно, (5.1) записать и так:

$$ae^{-i\omega t}, \quad (5.2)$$

где

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

а M — масса покоя атомного состояния или частицы. Существуют три разных способа определения энергии: по частоте амплитуды, по энергии в классическом смысле или по инертной массе. Все они равнозначны; это просто разные способы выражать одно и то же.

Вам может показаться, что странно представлять себе «частицу», обладающую одинаковыми амплитудами оказаться в пространстве где угодно. Ведь, помимо прочего, мы всегда представляем себе «частицу» как небольшой предмет, расположенный «где-то». Но не забудьте о принципе неопределенности. Если частица обладает определенной энергией, то и импульс

у нее определенный. Если неопределенность в импульсе равна нулю, то соотношение неопределенностей $\Delta p \Delta x = \hbar$ говорит, что неопределенность в положении должна быть бесконечной; именно это мы и утверждаем, говоря, что существует одинаковая амплитуда обнаружить частицу во всех точках пространства.

Если внутренние части атома находятся в другом состоянии с другой полной энергией, тогда амплитуда меняется во времени по-другому. А если вы не знаете, в каком состоянии находится атом, то появится некоторая амплитуда пребывания в одном состоянии и некоторая амплитуда пребывания в другом, и у каждой из этих амплитуд будет своя частота. Между этими двумя разными компонентами появится интерференция наподобие биений, которые могут проявиться как переменная вероятность. Внутри атома будет что-то «назревать», даже если он будет «в покое» в том смысле, что его центр масс не будет двигаться. Если же атом обладает только одной определенной энергией, то амплитуда дается формулой (5.1) и квадрат модуля амплитуды от времени не зависит. Следовательно, вы видите, что если энергия какой-то вещи определена и если вы задаете вопрос о *вероятности* чего-то в этой вещи, то ответ от времени не зависит. Хотя сами *амплитуды* от времени зависят, но если энергия *определенная*, они изменяются как мнимая экспонента и абсолютное значение (модуль) их не меняется.

Вот почему мы часто говорим, что атом на определенном энергетическом уровне находится в *стационарном состоянии*. Если вы что-то внутри него измеряете, вы обнаруживаете, что ничего (по вероятности) во времени не меняется. Чтобы вероятность менялась во времени, должна быть интерференция двух амплитуд при двух разных частотах, а это означало бы, что неизвестно, какова энергия. У предмета были бы одна амплитуда пребывания в состоянии с одной энергией и другая амплитуда пребывания в состоянии с другой энергией. Так в квантовой механике описывается что-то, если *поведение* этого «чего-то» зависит от времени.

Если имеется случай, когда смешаны два различных состояния с разными энергиями, то амплитуды каждого из двух состояний меняются со временем согласно уравнению (5.2), скажем, как

$$e^{-i(E_1/\hbar)t} \quad \text{и} \quad e^{-i(E_2/\hbar)t}. \quad (5.3)$$

И если имеется комбинация этих двух состояний, то появится интерференция. Но заметьте, что добавление к обеим энергиям одной и той же константы ничего не меняет. Если кто-то другой пользовался другой шкалой энергий, на которой все энергии сдвинуты на константу (скажем, на A), то амплитуды оказаться

в этих двух состояниях, с его точки зрения, были бы

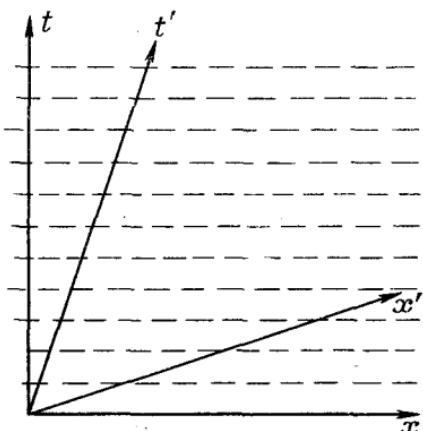
$$e^{-i(E_1+A)t/\hbar} \quad \text{и} \quad e^{-i(E_2+A)t/\hbar}. \quad (5.4)$$

Все его амплитуды оказались бы умноженными на один и тот же множитель $\exp[-i(A/\hbar)t]$, и во все линейные комбинации, во все интерференции вошел бы тот же множитель. Вычисляя для определения вероятностей модули, он пришел бы к тем же ответам. Выбор начала отсчета на нашей шкале энергий ничего не меняет; энергию можно отсчитывать от любого нуля. В релятивистских задачах приятнее измерять энергию так, чтобы в нее входила масса покоя, но для многих других нерелятивистских целей часто лучше вычесть из всех появляющихся энергий стандартную величину. Например, в случае атома обычно бывает удобно вычесть энергию $M_s c^2$, где M_s — масса *отдельных* его частей, ядра и электронов, отличающаяся, конечно, от массы самого атома. В других задачах полезно бывает вычесть из всех энергий число $M_g c^2$, где M_g — масса всего атома в *основном* состоянии; тогда остающаяся энергия есть просто энергия возбуждения атома. Значит, порой мы имеем право сдвигать наш нуль энергии очень и очень сильно, и это все равно ничего не меняет (при условии, что все энергии в данном частном расчете сдвинуты на одно и то же число). На этом мы расстанемся с покоящимися частицами.

§ 2. Равномерное движение

Если мы предполагаем, что теория относительности верна, то частица, покоящаяся в одной инерциальной системе, в другой инерциальной системе может оказаться в равномерном движении. В системе покоя частицы амплитуда вероятности

Фиг. 5.1. Релятивистское преобразование амплитуды покоящейся частицы в систему $x-t$.



для всех x , y и z одинакова, но зависит от t . Величина амплитуды для всех t одинакова, а фаза зависит от t . Мы можем получить картину поведения амплитуды, если проведем линии равной фазы (скажем, нулевой) как функций x и t . Для частицы в покое эти линии равной фазы параллельны оси x и расположены по оси t на равных расстояниях (показано пунктирными линиями на фиг. 5.1).

В другой системе, x' , y' , z' , t' , движущейся относительно частицы, скажем, в направлении x , координаты x' и t' некоторой частной точки пространства связаны с x и t преобразованием Лоренца. Это преобразование можно изобразить графически, проведя оси x' и t' , как показано на фиг. 5.1 [см. гл. 17 (вып. 2), фиг. 17.2]. Вы видите, что в системе $x' - t'$ точки равной фазы * вдоль оси t' расположены на других расстояниях, так что частота временных изменений уже другая. Кроме того, фаза меняется и по x' , т. е. амплитуда вероятности должна быть функцией x' .

При преобразовании Лоренца для скорости v , направленной, скажем, вдоль отрицательного направления x , время t связано со временем t' формулой

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

и теперь наша амплитуда меняется так:

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

В штрихованной системе она меняется в пространстве и во времени. Если амплитуду записать в виде

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

то видно, что $E'_p = E_0/\sqrt{1-v^2/c^2}$. Это энергия, вычисленная по классическим правилам для частицы с энергией покоя E_0 , движущейся со скоростью v ; $p' = E'_p v/c^2$ — соответствующий импульс частицы.

Вы знаете, что $x_\mu = (t, x, y, z)$ и $p_\mu = (E, p_x, p_y, p_z)$ — четырехвекторы, а $p_\mu x_\mu = Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}$ — скалярный инвариант. В системе покоя частицы $p_\mu x_\mu$ просто равно Et ; значит, при преобразо-

* Мы предполагаем, что фазы обязаны иметь одно и то же значение в соответствующих точках в двух системах координат. Впрочем, это весьма тонкое место, поскольку в квантовой механике фаза в значительной степени произвольна. Чтобы до конца оправдать это предположение, нужны более детальные рассуждения, учитывающие интерференцию двух или нескольких амплитуд.

вании в другую систему Et следует заменить на

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

Итак, амплитуда вероятности для частицы, импульс которой есть \mathbf{p} , будет пропорциональна

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

где E_p — энергия частицы с импульсом p , т. е.

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

а E_0 , как и прежде, — энергия покоя. В нерелятивистских задачах можно писать

$$E_p = M_s c^2 + W_p, \quad (5.7)$$

где W_p — избыток (или нехватка) энергии по сравнению с энергией покоя $M_s c^2$ частей атома. В общем случае в W_p должны были бы войти и кинетическая энергия атома, и его энергия связи или возбуждения, которые можно назвать «внутренней» энергией. Тогда мы бы писали

$$W_p = W_{\text{внутр}} + \frac{p^2}{2M}, \quad (5.8)$$

а амплитуды имели бы вид

$$e^{-(i/\hbar)(W_p t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x})}. \quad (5.9)$$

Мы собираемся все расчеты вести нерелятивистски, так что именно таким видом амплитуд вероятностей мы и будем пользоваться.

Заметьте, что наше релятивистское преобразование снабдило нас формулой для изменения амплитуды атома, движущегося в пространстве, не требуя каких-либо добавочных допущений. Волновое число ее изменений в пространстве, как это следует из (5.9), равно

$$k = \frac{p}{\hbar}, \quad (5.10)$$

а, значит, длина волны

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi \hbar}{p}. \quad (5.11)$$

Это та самая длина волны, которую мы раньше использовали для частиц с импульсом p . Именно таким путем де-Бройль впервые пришел к этой формуле. Для движущейся частицы *частота изменения амплитуды* по-прежнему дается формулой

$$\hbar\omega = W_p. \quad (5.12)$$

Абсолютная величина (5.9) равна просто единице, так что для частицы, движущейся с определенной энергией, вероятность обнаружить ее где бы то ни было — одна и та же повсюду и со временем не меняется. (Важно отметить, что амплитуда — это комплексная волна. Если бы мы пользовались вещественной синусоидой, то ее квадрат от точки к точке менялся бы, что было бы неверно.)

Конечно, мы знаем, что бывают случаи, когда частицы движутся от одного места к другому, так что вероятность зависит от положения и изменяется со временем. Как же нужно описывать такие случаи? Это можно сделать, рассматривая амплитуды, являющиеся суперпозицией двух или большего числа амплитуд для состояний с определенной энергией. Такое положение мы уже обсуждали в гл. 48 (вып. 4), причем именно для амплитуд вероятности! Мы нашли тогда, что сумма двух амплитуд с разными волновыми числами k (т. е. импульсами) и частотами ω (т. е. энергиями) приводит к интерференционным буграм, или биениям, так что квадрат амплитуды меняется и в пространстве, и во времени. Мы нашли также, что эти биения движутся с так называемой «групповой скоростью», определяемой формулой

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

где Δk и $\Delta\omega$ — разности волновых чисел и частот двух волн. В более сложных волнах, составленных из суммы многих амплитуд с близкими частотами, групповая скорость равна

$$v_{\text{гр}} = \frac{d\omega}{dk}. \quad (5.13)$$

Так как $\omega = E_p/\hbar$, а $k = p/\hbar$, то

$$v_{\text{гр}} = \frac{dE_p}{dp}. \quad (5.14)$$

Но из (5.6) следует, что

$$\frac{dE_p}{dp} = c^2 \frac{p}{E_p}, \quad (5.15)$$

а так как $E_p = Mc^2$, то

$$\frac{dE_p}{dp} = \frac{p}{M}, \quad (5.16)$$

а это как раз классическая скорость частицы. Даже применяя нерелятивистские выражения, мы будем иметь

$$\omega = \frac{W_p}{\hbar} \quad \text{и} \quad k = \frac{p}{\hbar}$$

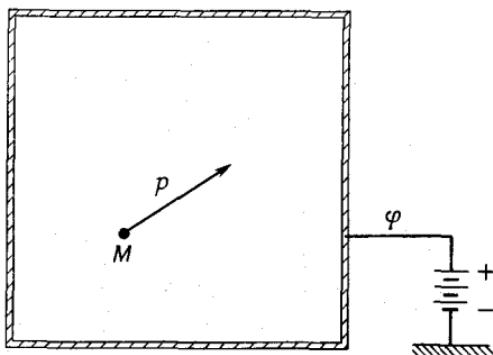
$$\frac{d\omega}{dk} = \frac{dW}{dp} = \frac{d}{dp} \left(\frac{p^2}{2M} \right) = \frac{p}{M}, \quad (5.17)$$

т. е. опять классическую скорость.

Результат наш, следовательно, состоит в том, что если имеется несколько амплитуд для чистых энергетических состояний с почти одинаковой энергией, то их интерференция приводит к «всплескам» вероятности, которые движутся сквозь пространство со скоростью, равной скорости классической частицы с такой же энергией. Но нужно, однако, заметить, что, когда мы говорим, что можем складывать две амплитуды с разными волновыми числами, чтобы получать пакеты, отвечающие движущейся частице, мы при этом вносим нечто новое — нечто, не выводимое из теории относительности. Мы сказали, как меняется амплитуда у неподвижной частицы, и затем вывели из этого, как она должна была бы меняться, если бы частица двигалась. Но из этих рассуждений мы *не в состоянии* вывести, что случилось бы, если бы были *две* волны, движущиеся с разными скоростями. Если мы остановим одну из них, мы не сможем остановить другую. Так что мы втихомолку добавили *еще одну* гипотезу: кроме того, что (5.9) есть *возможное* решение, мы допускаем, что у той же системы могут быть еще решения со всевозможными r и что различные члены будут интерферировать.

§ 3. Потенциальная энергия; сохранение энергии

А теперь мы хотели бы выяснить вопрос о том, что бывает, когда энергия частицы может меняться. Начнем с размышления о частице, которая движется в поле сил, описываемом потенциалом. Рассмотрим сперва влияние постоянного потенциала. Пусть у нас имеется большой металлический ящик, который мы зарядили до некоторого электростатического потенциала φ (фиг. 5.2). Если внутри ящика есть заряженные объекты, то их



Фиг. 5.2. Частица с массой M и импульсом p в области постоянного потенциала.

потенциальная энергия будет равна $q\phi$; мы обозначим это число буквой V . Оно по условию совершенно не зависит от положения самого объекта. От наложения потенциала никаких физических изменений внутри ящика не произойдет, ведь постоянный потенциал ничего не меняет в том, что происходит внутри ящика. Значит, закон, по которому теперь будет меняться амплитуда, вывести никак нельзя. Можно только догадаться. Вот он, правильный ответ — он выглядит примерно так, как и следовало ожидать: вместо энергии нужно поставить сумму потенциальной энергии V и энергии E_p , которая сама есть сумма внутренней и кинетической энергий. Амплитуда тогда будет пропорциональна

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

Общий принцип состоит в том, что коэффициент при t , который можно было бы назвать ω , всегда дается полной энергией системы: внутренней энергией («энергией массы») плюс кинетическая энергия плюс потенциальная энергия:

$$\hbar\omega = E_p + V. \quad (5.19)$$

Или в нерелятивистском случае

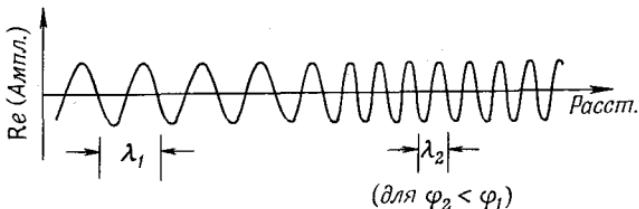
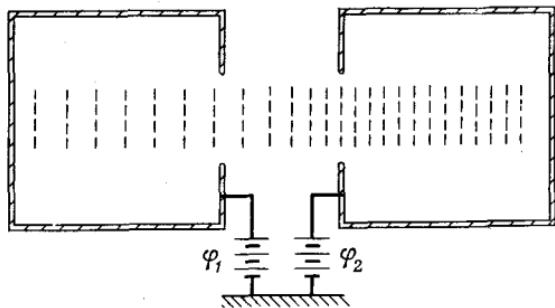
$$\hbar\omega = W_{\text{внутр}} + \frac{p^2}{2M} + V. \quad (5.20)$$

Ну, а что можно сказать о физических явлениях внутри ящика? Если физическое состояние не одно, а несколько, то что мы получим? В амплитуду каждого состояния войдет один и тот же добавочный множитель

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

сверх того, что было при $V=0$. Это ничем не отличается от сдвига нуля нашей энергетической шкалы. Получится одинаковый сдвиг всех фаз всех амплитуд, а это, как мы раньше убедились, не меняет никаких вероятностей. Все физические явления остаются теми же. (Мы предположили, что речь идет о разных состояниях одного и того же заряженного объекта, так что $q\phi$ у них у всех одинаково. Если бы объект мог менять свой заряд, переходя от одного состояния к другому, то мы пришли бы к совершенно другому результату, но сохранение заряда предохраняет нас от этого.)

До сих пор наше допущение согласовывалось с тем, чего следовало ожидать от простого изменения уровня отсчета энергии. Но если оно на самом деле справедливо, то обязано выполняться и для потенциальной энергии, которая не является просто постоянной. В общем случае V может меняться произвольным образом и во времени, и в пространстве, и окончательный результат для амплитуды должен выражаться на



Фиг. 5.3. Амплитуда для частицы, переходящей от одного потенциала к другому.

языке дифференциальных уравнений. Но мы не хотим сразу приступить к общему случаю, а ограничимся некоторым представлением о том, что происходит. Так что пока мы рассмотрим только потенциал, который постоянен во времени и медленно меняется в пространстве. Тогда мы сможем сравнить между собой классические и квантовые представления.

Предположим, что мы размыслим о случае, изображенном на фиг. 5.3, где два ящика поддерживаются при постоянных потенциалах ϕ_1 и ϕ_2 , а в области между ними потенциал плавно меняется от ϕ_1 к ϕ_2 . Вообразим, что у некоторой частицы есть амплитуда оказаться в одной из этих областей. Допустим также, что импульс достаточно велик, так что в любой малой области, в которой помещается много длин волн, потенциал почти постоянен. Тогда мы вправе считать, что в любой части пространства амплитуда обязана выглядеть так, как (5.18), только V в каждой части пространства будет свое.

Рассмотрим частный случай, когда $\phi_1=0$, так что потенциальная энергия в первом ящике равна нулю, во втором же пусть $q\phi_2$ будет отрицательно, так что классически частица в нем будет обладать большей кинетической энергией. В классическом смысле она во втором ящике будет двигаться быстрее, у нее будет, стало быть, и больший импульс. Посмотрим, как это может получиться из квантовой механики.

При наших предположениях амплитуда в первом ящике должна быть пропорциональна

$$e^{-(i/\hbar) [(W_{\text{внутр}} + p_1^2/2M + V_1) t - \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{x}]} \quad (5.21)$$

а во втором

$$e^{-(i/\hbar) \left[(W_{\text{внутр}} + p_2^2/2M + V_2) t - \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{x} \right]}. \quad (5.22)$$

(Будем считать, что внутренняя энергия не изменяется, а остается в обеих областях одной и той же.) Вопрос заключается в следующем: как эти две амплитуды сопрягаются друг с другом в области между ящиками?

Мы будем считать, что все потенциалы во времени постоянны, так что в условиях ничего не меняется. Затем мы предположим, что изменения амплитуды (т. е. ее фазы) всюду обладают одной и той же частотой, потому что в «среде» между ящиками нет, так сказать, ничего, что бы зависело от времени. Если в пространстве ничего не меняется, то можно считать, что волна в одной области «генерирует» во всем пространстве вспомогательные волны, которые все колеблются с одинаковой частотой и, подобно световым волнам, проходящим через покоящееся вещество, не меняют своей частоты. Если частоты в (5.21) и (5.22) одинаковы, то должно выполняться равенство

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

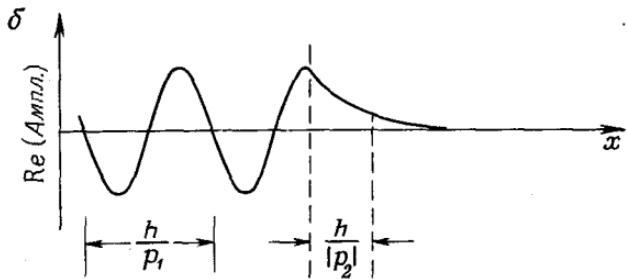
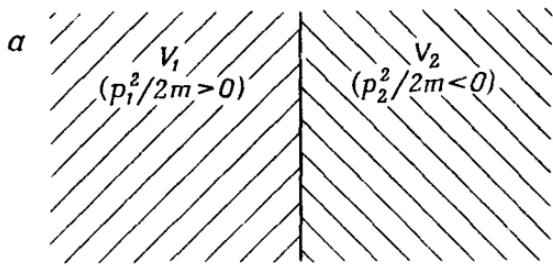
Здесь по обе стороны стоят просто классические полные энергии, так что (5.23) есть утверждение о сохранении энергии. Иными словами, классическое утверждение о сохранении энергии вполне равноценно квантовомеханическому утверждению о том, что частоты у частицы всюду одинаковы, если условия во времени не меняются. Все это согласуется с представлением о том, что $\hbar\omega = E$.

В том частном случае, когда $V_1=0$, а V_2 отрицательно, (5.23) означает, что p_2 больше p_1 , т. е. в области 2 волны короче. Поверхности равной фазы показаны на фиг. 5.3 пунктиром. Там еще вычерчен график вещественной части амплитуды, из которого тоже видно, как уменьшается длина волны при переходе от области 1 в область 2. Групповая скорость волн, равная p/M , тоже возрастает так, как и следовало ожидать из классического сохранения энергии, потому что оно просто совпадает с (5.23).

Существует интересный частный случай, когда V_2 становится столь большим, что V_2-V_1 уже превышает $p_1^2/2M$. Тогда p_2^2 , даваемое формулой

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

становится отрицательным. А это значит, что p_2 — мнимое число, скажем ip' . Классически мы бы сказали, что частица



Фиг. 5.4. Амплитуда для частицы, приближающейся к сильно отталкивающему потенциальному барьеру.

никогда не попадет в область 2, ей не хватит энергии, чтобы взобраться на потенциальный холм. Однако в квантовой механике амплитуда по-прежнему представляется уравнением (5.22); ее изменения в пространстве по-прежнему следуют закону

$$\rho(i\hbar p_2 \cdot x)$$

Но раз p_2 — мнимое число, то пространственная зависимость превращается в вещественную экспоненту. Если, скажем, частица сперва двигалась в направлении $+x$, то амплитуда начнет меняться, как

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

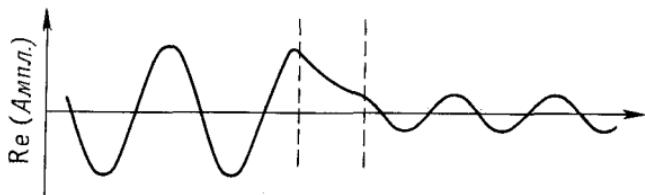
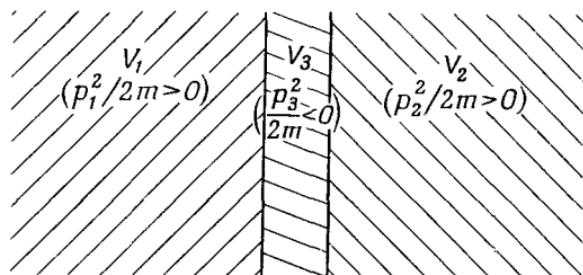
С ростом x она быстро падает.

Вообразим, что обе области с разными потенциалами расположены очень тесно друг к другу, так что потенциальная энергия вдруг изменяется от V_1 к V_2 (фиг. 5.4, а). Начертав график вещественной части амплитуды вероятности, мы получим зависимость, показанную на фиг. 5.4, б. Волна в области 1 отвечает частице, пытающейся попасть в область 2, но там амплитуда быстро спадает. Имеется какой-то шанс, что ее заметят в области 2, где классически она ни за что бы не оказалась, но амплитуда этого очень мала (кроме места близ самой границы). Положение вещей очень похоже на то, что мы обнаружили для полного внутреннего отражения света. Обычно свет не выходит, но его можно все же заметить, если

поставить что-нибудь на расстоянии в одну-две длины волны от поверхности.

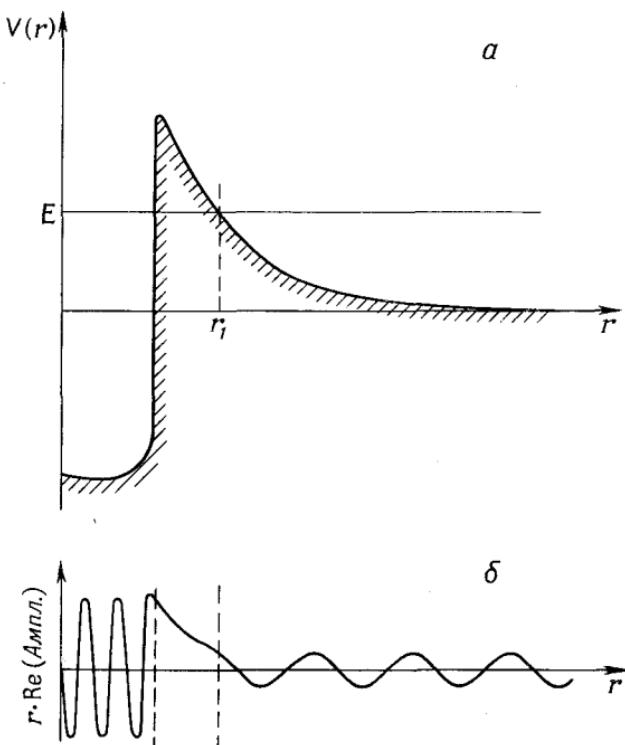
Вспомните, что если поместить вторую поверхность вплотную к границе, где свет полностью отражался, то можно добиться того, чтобы во втором куске вещества все же распространялся какой-то свет. То же самое происходит и с частицами в квантовой механике. Если имеется узкая область с таким высоким потенциалом V , что классическая кинетическая энергия там отрицательна, то частица никогда не пройдет сквозь нее. Но в квантовой механике экспоненциально убывающая амплитуда может пробиться сквозь эту область и дать слабую вероятность того, что частицу обнаружат по другую сторону — там, где кинетическая энергия опять положительна. Все это изображено на фиг. 5.5. Эффект называется квантовомеханическим «проникновением сквозь барьер».

Проникновение квантовомеханической амплитуды сквозь барьер дает объяснение (или описание) α -распада ядра урана. Кривая зависимости потенциальной энергии α -частицы от расстояния от центра показана на фиг. 5.6, *a*. Если бы попытаться выстрелить α -частицей с энергией E в ядро, то она почувствовала бы электростатическое отталкивание от ядерного заряда z и по классическим канонам не подошла бы к ядру ближе, чем на такое расстояние r_1 , при котором ее полная энергия сравняется с потенциальной V . Но где-то внутри ядра потенциальная энергия оказывается намного ниже из-за сильного притяже-



Фиг. 5.5. Проникновение амплитуды сквозь потенциальный барьер.

ния короткодействующих ядерных сил. Как же тогда объяснить, отчего при радиоактивном распаде мы обнаруживаем α -частицы, которые, первоначально находясь внутри ядра, оказываются затем снаружи него с энергией E ? Потому что они, с самого начала обладая энергией E , «просочились» сквозь потенциальный барьер. Схематичный набросок амплитуды вероятности дан на фиг. 5.6, б, хотя на самом деле экспоненциальный спад много сильнее, чем показано. Весьма примечательно, что среднее время жизни α -частицы в ядре урана достигает $4^{1/2}$ миллиарда лет, тогда как естественные колебания внутри ядра чрезвычайно быстры, их в секунду бывает $10^{22}!$ Как же можно из 10^{-22} сек получить число порядка 10^9 лет? Ответ состоит в том, что экспонента дает неслыханно малый множитель порядка 10^{-45} , что и приводит к очень малой, хоть и вполне определенной, вероятности просачивания. Если уж α -частица попала в ядро, то почти нет никакой амплитуды обнаружить ее не в ядре; если, однако, взять таких ядер побольше и подождать подольше, то вам, может быть, повезет и вы увидите, как частица высочит наружу.



Фиг. 5.6. Потенциал α -частицы в ядре урана (а) и качественный вид амплитуды вероятности (б).

§ 4. Силы; классический предел

Предположим, что частица движется сквозь область, где есть потенциал, меняющийся поперек движения. Классически мы бы описали этот случай так, как показано на фиг. 5.7. Если частица движется в направлении x и вступает в область, где имеется потенциал, изменяющийся вдоль y , то частица получит поперечное ускорение от силы $F = -\partial V/\partial y$. Если сила присутствует только в ограниченной области шириной w , то она будет действовать только в течение времени w/v . Частица получит поперечный импульс

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

Тогда угол отклонения $\delta\theta$ будет равен

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

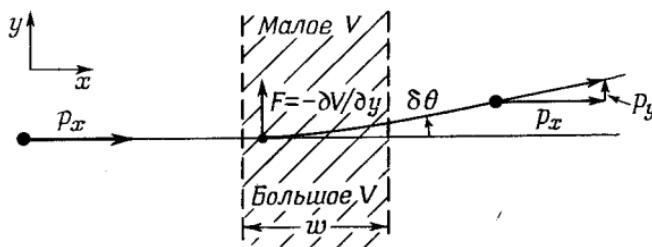
где p — начальный импульс. Подставляя вместо F число $-\partial V/\partial y$, получаем

$$\delta\theta = -\frac{w}{pv} \frac{\partial V}{\partial y}. \quad (5.26)$$

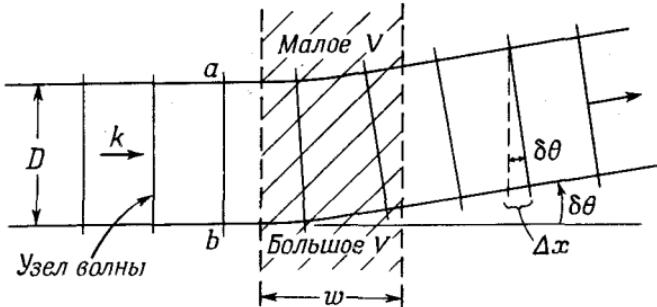
Теперь нам предстоит выяснить, удастся ли получить этот результат с помощью представления о том, что волны подчиняются уравнению (5.20). Мы рассмотрим то же самое явление квантовомеханически, предполагая, что все масштабы в нем намного превосходят длины волн наших амплитуд вероятности. В любой маленькой области можно считать, что амплитуда меняется как

$$e^{-(i/\hbar) [(W + p^2/2M + V) t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}]} \quad (5.27)$$

В состоянии ли мы увидеть, как отсюда получится отклонение частиц, когда у V будет поперечный градиент? На фиг. 5.8 мы прикинули, как будут выглядеть волны амплитуды вероятности. Мы начертили ряд «узлов волн», которые вы можете считать, скажем, поверхностями, где фаза амплитуды равна



Фиг. 5.7. Отклонение частицы поперечным градиентом потенциала.



Фиг. 5.8. Амплитуда вероятности в области с поперечным градиентом потенциала.

нулю. В любой небольшой области длина волны (расстояние между соседними узлами) равна

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

где p связано с V формулой

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

В области, где V больше, там p меньше, а волны длиннее. Поэтому направление линий узлов волны постепенно меняется, как показано на рисунке.

Чтобы найти изменение наклона линий узлов волн, заметим, что на двух путях a и b имеется разность потенциалов $\Delta V = (\partial V / \partial y) D$, а значит, и разница Δp между импульсами. Эту разность можно получить из (5.28):

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

Волновое число p/\hbar поэтому тоже на разных путях различно, что означает, что фазы растут вдоль них с разной скоростью. Разница в скорости роста фаз есть $\Delta k = \Delta p / \hbar$, и накопленная на всем пути w разность фаз будет равна

$$\Delta(\text{фаз}) = \Delta k w = \frac{\Delta p}{\hbar} w = -\frac{M}{p\hbar} \Delta V w. \quad (5.30)$$

Это число показывает, на сколько к моменту выхода из полосы фаза вдоль пути b «опережает» фазу вдоль пути a . Но на выходе из полосы такое опережение фаз отвечает опережению узла волны на величину

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

или

$$\Delta x = -\frac{M}{p^2} \Delta V w. \quad (5.31)$$

Обращаясь к фиг. 5.8, мы видим, что новый фронт волны повернется на угол $\delta\theta$, даваемый формулой

$$\Delta x = D\delta\theta, \quad (5.32)$$

так что мы имеем

$$D\delta\theta = -\frac{M}{p^2} \Delta V w. \quad (5.33)$$

А это совпадает с (5.26), если заменить p/M на v , а $\Delta V/D$ на $\partial V/\partial y$.

Результат, который мы только что получили, верен лишь, когда потенциал меняется медленно и плавно — в так называемом *классическом пределе*. Мы показали, что при этих условиях получим те же движения частиц, что получились бы и из $F=ma$, если предположить, что потенциал дает вклад в фазу амплитуды вероятности, равный Vt/\hbar . В *классическом пределе квантовая механика оказывается в согласии с ньютоновской механикой*.

§ 5. «Прецессия» частицы со спином $1/2$

Заметьте, что мы не предполагали, что потенциальная энергия у нас какая-то особая, это просто энергия, производная от которой дает силу. Например, в опыте Штерна — Герлаха энергия имела вид $U = -\mu \cdot B$; отсюда при наличии у B пространственной вариации и получалась сила. Если бы нам нужно было квантовомеханическое описание опыта, мы должны были бы сказать, что у частиц в одном пучке энергия меняется в одну сторону, а в другом пучке — в обратную сторону. (Магнитную энергию U можно было бы вставить либо в потенциальную энергию V , либо во «внутреннюю» энергию W ; куда именно, совершенно неважно.) Из-за вариаций энергии волны преломляются, пучки искривляются вверх или вниз. (Мы теперь знаем, что квантовая механика предсказывает то же самое искривление, которое следует и из расчета по классической механике.)

Из зависимости амплитуды от потенциальной энергии также следует, что у частицы, сидящей в однородном магнитном поле, направленном по оси z , амплитуда вероятности обязана меняться во времени по закону

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

(Можно считать это просто определением μ_z .) Иначе говоря, если поместить частицу в однородное поле B на время t , то ее

амплитуда вероятности умножится на

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

сверх того, что было бы без поля. Поскольку у частицы со спином $1/2$ величина μ_z может быть равна плюс или минус какому-то числу, скажем μ , то у двух мыслимых состояний в однородном поле фазы будут меняться с одинаковой скоростью в противоположные стороны. Амплитуды помножатся на

$$e^{\pm(i/\hbar)\mu B\tau}. \quad (5.34)$$

Этот результат приводит к интересным следствиям. Пусть частица со спином $1/2$ находится в каком-то состоянии, которое не есть ни чистое состояние со спином вверх, ни чистое состояние со спином вниз. Его можно описать через амплитуды пребывания в этих двух состояниях. Но в магнитном поле у этих двух состояний фазы начнут меняться с разной скоростью. И если мы поставим какой-нибудь вопрос насчет амплитуд, то ответ будет зависеть от того, сколько времени частица провела в этом поле.

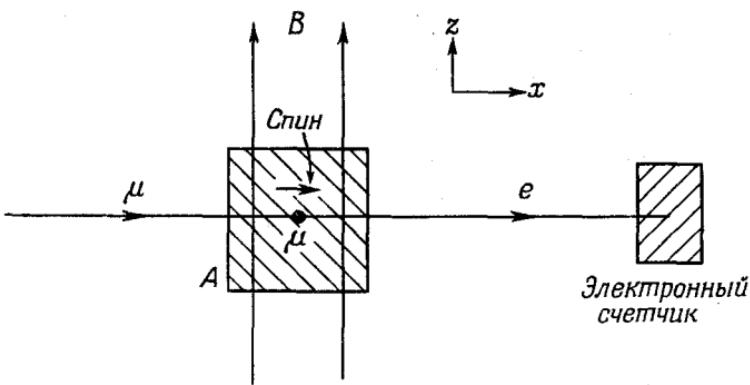
В виде примера рассмотрим распад мюона в магнитном поле. Когда мюоны возникают в результате распада π -мезонов, они оказываются поляризованными (иными словами, у них есть предпочтительное направление спина). Мюоны в свою очередь распадаются (в среднем через 2,2 мксек), испуская электрон и пару нейтрино:

$$\mu \rightarrow e + v + \bar{v}.$$

При этом распаде оказывается, что (по крайней мере при высоких энергиях) электроны испускаются преимущественно в направлении, противоположном направлению спина мюона.

Допустим затем, что имеется экспериментальное устройство (фиг. 5.9): поляризованные мюоны входят слева и в блоке вещества A останавливаются, а чуть позже распадаются. Испускаемые электроны выходят, вообще говоря, во всех мыслимых направлениях. Представим, однако, что все мюоны будут входить в тормозящий блок A так, что их спины будут повернуты в направлении x . Без магнитного поля там наблюдалось бы какое-то угловое распределение направлений распада; мы же хотим знать, как изменилось бы это распределение при наличии магнитного поля. Можно ожидать, что оно как-то будет меняться со временем. То, что получится, можно узнать, спросив, какой будет в каждый момент амплитуда того, что мюон обнаружится в состоянии $(+x)$.

Эту задачу можно сформулировать следующим образом: пусть известно, что в момент $t=0$ спин мюона направлен по $+x$; какова амплитуда того, что в момент τ он окажется в том же состоянии? И хотя мы не знаем правил поведения частицы



Фиг. 5.9. Опыт с распадом мюона.

со спином $1/2$ в магнитном поле, перпендикулярном к спину, но зато мы знаем, что бывает с состояниями, когда спины направлены вверх или вниз по полю,— тогда их амплитуды умножаются на выражение (5.34). Наша процедура тогда будет состоять в том, чтобы выбрать представление, в котором базисные состояния — это направления спином вверх или спином вниз относительно z (относительно направления поля). И любой вопрос тогда сможет быть выражен через амплитуды этих состояний.

Пусть $|\psi(t)\rangle$ представляет состояние мюона. Когда он входит в блок A , его состояние есть $|\psi(0)\rangle$, а мы хотим знать $|\psi(\tau)\rangle$ в более позднее время τ . Если два базисных состояния обозначить $(+z)$ и $(-z)$, то нам известны амплитуды $\langle +z|\psi(0)\rangle$ и $\langle -z|\psi(0)\rangle$ — они известны потому, что мы знаем, что $|\psi(0)\rangle$ представляет собой состояние со спином в направлении $(+x)$. Из предыдущей главы следует, что эти амплитуды равны*

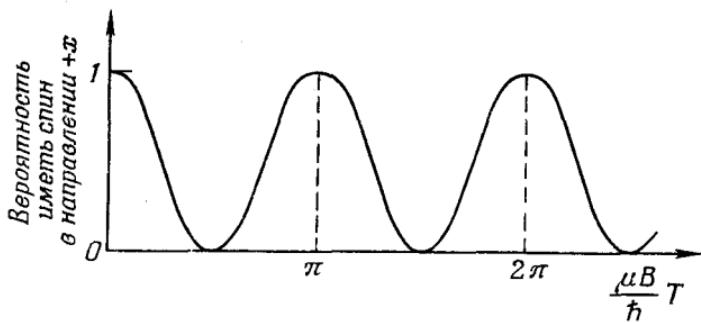
$$\langle +z | +x \rangle = C_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

и (5.35)

$$\langle -z | +x \rangle = C_- = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Они оказываются одинаковыми. Раз они относятся к положению при $t=0$, обозначим их $C_+(0)$ и $C_-(0)$.

* Если вы пропустили гл. 4, то можете пока просто считать (5.35) невыведенным правилом. Позже, в гл. 8, мы разберем прецессию спина подробнее, будут получены и эти амплитуды.



Фиг. 5.10. Временная зависимость вероятности того, что частица со спином $1/2$ окажется в состоянии $(+)$ по отношению оси x .

Далее, мы знаем, что из этих двух амплитуд получится со временем. Из (5.34) следует

$$C_+(t) = C_+(0) e^{-(i/\hbar) \mu B t} \quad (5.36)$$

и

$$C_-(t) = C_-(0) e^{+(i/\hbar) \mu B t}.$$

Но если нам известны $C_+(t)$ и $C_-(t)$, то у нас есть все, чтобы знать условия в момент t . Надо преодолеть только еще одно затруднение: нужна-то нам вероятность того, что спин (в момент t) окажется направленным по $+x$. Но наши общие правила учитывают и эту задачу. Мы пишем, что амплитуда пребывания в состоянии $(+x)$ в момент t [обозначим ее $A_+(t)$] есть

$$A_+(t) = \langle +x | \psi(t) \rangle = \\ = \langle +x | +z \rangle \langle +z | \psi(t) \rangle + \langle +x | -z \rangle \langle -z | \psi(t) \rangle,$$

или

$$A_+(t) = \langle +x | +z \rangle C_+(t) + \langle +x | -z \rangle C_-(t). \quad (5.37)$$

Опять пользуясь результатом последней главы (или лучше равенством $\langle \varphi | \chi \rangle = \langle \chi | \varphi \rangle^*$ из гл. 3), мы пишем

$$\langle +x | +z \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \langle +x | -z \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Итак, в (5.37) все известно. Мы получаем

$$A_+(t) = \frac{1}{2} e^{(i/\hbar) \mu B t} + \frac{1}{2} e^{-(i/\hbar) \mu B t},$$

или

$$A_+(t) = \cos \frac{\mu B}{\hbar} t.$$

Поразительно простой результат! Заметьте: ответ согласуется с тем, что ожидалось при $t=0$. Мы получаем $A_+(0)=1$, и это вполне правильно, потому что сперва и было предположено, что при $t=0$ мюон был в состоянии $(+x)$.

Вероятность P_+ того, что мюон окажется в состоянии $(+x)$ в момент t , есть $(A_+)^2$, т. е.

$$P_+ = \cos^2 \frac{\mu B t}{\hbar}.$$

Вероятность колеблется от нуля до единицы, как показано на фиг. 5.10. Заметьте, что вероятность возвращается к единице при $\mu B t / \hbar = \pi$ (а не при 2π). Из-за того что косинус возведен в квадрат, вероятность повторяется с частотой $2\mu B / \hbar$.

Итак, мы обнаружили, что шанс поймать в электронном счетчике, показанном на фиг. 5.9, распадный электрон периодически меняется с величиной интервала времени, в течение которого мюон сидел в магнитном поле. Частота зависит от магнитного момента μ . Именно таким образом и был на самом деле измерен магнитный момент мюона.

Тем же методом, конечно, можно воспользоваться, чтобы ответить на другие вопросы, касающиеся распада мюона. Например, как зависит от времени t шанс заметить распадный электрон в направлении y , под 90° к направлению x , но по-прежнему под прямым углом к полю? Если вы решите эту задачу, то увидите, что вероятность оказаться в состоянии $(+y)$ меняется как $\cos^2\{(\mu B t / \hbar) - (\pi/4)\}$; она колеблется с тем же периодом, но достигает максимума на четверть цикла позже, когда $\mu B t / \hbar = \pi/4$. На самом-то деле происходит вот что: с течением времени мюон проходит через последовательность состояний, отвечающих полной поляризации в направлении, которое непрерывно вращается вокруг оси z . Это можно описать, говоря, что *спин прецессирует* с частотой

$$\omega_p = \frac{2\mu B}{\hbar}. \quad (5.38)$$

Вам должно становиться понятно, в какую форму выливается квантовомеханическое описание, когда мы описываем поведение чего-либо во времени.

ГАМИЛЬТОНОВА МАТРИЦА

§ 1. Амплитуды
и векторы

§ 2. Излучение всевидящих состояний

§ 3. Статистика мира?

§ 4. Статистика
реальности
и времени

§ 5. Гамильтонова
матрица

§ 6. Амплитуда
излучения

§ 7. Амплитуда
излучения
и колебания

§ 1. Амплитуды и векторы

Прежде чем приступить к основной теме этой главы, мы хотели бы изложить несколько математических идей, которые часто встречаются в книгах по квантовой механике. Знание их облегчит вам чтение других книг или статей по этому предмету. Первая идея — это тесное математическое подобие между уравнениями квантовой механики и формулами для скалярного произведения двух векторов. Вы помните, что если χ и φ — два состояния, то амплитуда начать в φ и кончить в χ может быть записана в виде суммы (по полной совокупности базисных состояний) амплитуд перехода из φ в одно из базисных состояний и затем из этого базисного состояния уже в χ :

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \sum_{\text{Все } i} \langle \chi | i \rangle \langle i | \varphi \rangle. \quad (6.1)$$

Мы объясняли это при помощи прибора Штерна — Герлаха, но сейчас напоминаем вам, что в этих приборах нет нужды. Уравнение (6.1) — это математический закон, который верен всегда, все равно, есть ли у нас фильтровальное оборудование или нет; вообще совсем не обязательно воображать наличие какого-то прибора. Можно рассматривать это просто как формулу для амплитуды $\langle \chi | \varphi \rangle$.

Сопоставим (6.1) с формулой для скалярного произведения двух векторов B и A . Если B и A — обычные трехмерные векторы, то скалярное произведение можно написать так:

$$\sum_{\text{Все } i} (B \cdot e_i) (e_i \cdot A), \quad (6.2)$$

считая, что символ e_i обозначает любой из трех единичных векторов в направлениях x ,

y и z . Тогда $\mathbf{B} \cdot \mathbf{e}_1$ — это то, что обычно называют B_x , а $\mathbf{B} \cdot \mathbf{e}_2$ — то, что обычно называют B_y , и т. д. Значит, (6.2) эквивалентно

$$B_x A_x + B_y A_y + B_z A_z,$$

а это и есть скалярное произведение $\mathbf{B} \cdot \mathbf{A}$.

Сравнение (6.1) с (6.2) обнаруживает следующую аналогию. Состояния χ и φ соответствуют двум векторам \mathbf{A} и \mathbf{B} . Базисные состояния i отвечают специальным векторам \mathbf{e}_i , к которым мы относим все прочие векторы. Любой вектор может быть представлен как линейная комбинация трех «базисных векторов» \mathbf{e}_i . Далее, если вам известны коэффициенты при каждом «базисном векторе» в этой комбинации, т. е. три его компоненты, то вы знаете о векторе все. Точно так же любое квантовомеханическое состояние может быть полностью описано амплитудами $\langle i | \varphi \rangle$ перехода в базисные состояния, и если эти коэффициенты вам известны, то вы знаете все, что можно знать о состоянии. Из-за этой тесной аналогии то, что мы назвали «состоянием», часто именуют «вектором состояния».

Раз базисные векторы \mathbf{e}_i перпендикулярны друг другу, то существует соотношение

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}. \quad (6.3)$$

Это соответствует соотношению (3.25) между базисными состояниями i

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij}. \quad (6.4)$$

Теперь вы понимаете, почему говорят, что базисные состояния i все «ортогональны друг другу».

Между (6.1) и скалярным произведением есть одно минимальное различие. У нас

$$\langle \varphi | \chi \rangle = \langle \chi | \varphi \rangle^*, \quad (6.5)$$

а в векторной алгебре

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{A}.$$

В квантовой механике с ее комплексными числами мы обязаны выдерживать порядок множителей, а в скалярном произведении порядок неважен.

Теперь рассмотрим такое векторное уравнение:

$$\mathbf{A} = \sum_i \mathbf{e}_i (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{A}); \quad (6.6)$$

оно немножко необычно, но тем не менее верно. И означает оно то же самое, что и

$$\mathbf{A} = \sum_i A_i \mathbf{e}_i = A_x \mathbf{e}_x + A_y \mathbf{e}_y + A_z \mathbf{e}_z. \quad (6.7)$$

Заметьте, однако, что в (6.6) входит величина, отличная от скалярного произведения. Скалярное произведение — это просто число, а (6.6) — векторное уравнение. Одним из великих приемов векторного анализа было абстрагировать от уравнений идею самого вектора. Равным образом можно попытаться абстрагировать от уравнения (6.1) то, что в квантовой механике является аналогом «вектора». И это действительно можно сделать. Уберем $\langle \chi |$ по обе стороны (6.1) и напишем такое уравнение (не пугайтесь — это просто обозначение, и через пару минут вы узнаете, что означают эти символы):

$$|\varphi\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i| \varphi\rangle. \quad (6.8)$$

Скобку $\langle \chi | \varphi \rangle$ представляют себе состоящей из двух половинок. Вторую половинку $|\varphi\rangle$ называют *кет*, а первую $\langle \chi |$ называют *брэ* (поставленные рядом они образуют бра-кет=браскет, скоб-каскобка — обозначение, предложенное Дираком); полусимволы $\langle \chi |$ и $|\varphi\rangle$ также называют *векторами состояний*. Это не числа отнюдь, а нам вообще-то нужно, чтобы результаты наших расчетов выражались числами; стало быть, такие «незаконченные» величины представляют собой промежуточные шаги в расчетах.

До сих пор мы все свои результаты выражали с помощью чисел. Как же мы умудрялись избегать векторов? Забавно, что даже в обычной векторной алгебре можно сделать так, чтобы во все уравнения входили только числа. Например, вместо векторного уравнения типа

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a}$$

всегда можно написать

$$\mathbf{C} \cdot \mathbf{F} = \mathbf{C} \cdot (m\mathbf{a}).$$

Получается уравнение, связывающее скалярные произведения и справедливое для любого вектора \mathbf{C} . Но если оно верно для любого \mathbf{C} , то едва ли имеет смысл вообще писать это \mathbf{C} !

Теперь вернемся к (6.1). Это уравнение справедливо при любых χ . Значит, для сокращения письма мы должны просто убрать χ и написать вместо (6.1) уравнение (6.8). Это уравнение снабдит нас той же самой информацией, лишь бы мы понимали, что его всегда надлежит «завершить», «умножив слева на...», т. е. просто дописав некоторое $\langle \chi |$ по обе стороны знака равенства. Следовательно, (6.8) означает в точности то же, что и (6.1), — ни более ни менее. Если вы предпочитаете числа, вы подставляете то $\langle \chi |$, которое вам нужно.

Может быть, вы в уравнении (6.8) уже нацелились и на φ ? Раз (6.8) справедливо при любом φ , зачем же нам его держать? И действительно, Дирак предлагает абстрагироваться и от

ψ , так что остается только

$$| = \sum_i | i \rangle \langle i |. \quad (6.9)$$

Вот он каков — великий закон квантовой механики! Этот закон утверждает, что если вы вставите любые два состояния χ и ϕ с обеих сторон, слева и справа, то опять вернетесь к (6.1). Уравнение (6.9) вообще-то не очень полезно, но зато является неплохим напоминанием о том, что уравнение выполняется для любых двух состояний.

§ 2. Разложение векторов состояний

Посмотрим на уравнение (6.8) еще раз; его можно рассматривать следующим образом. Любой вектор состояния $|\varphi\rangle$ может быть представлен в виде линейной комбинации совокупности базисных «векторов» с подходящими коэффициентами, или, если угодно, в виде суперпозиции «единичных векторов» в подходящих пропорциях. Чтобы подчеркнуть, что коэффициенты $\langle i | \varphi \rangle$ — это просто обычные (комплексные) числа, напишем

$$\langle i | \varphi \rangle = C_i.$$

Тогда (6.8) совпадает с

$$| \varphi \rangle = \sum_i | i \rangle C_i. \quad (6.10)$$

Такое же уравнение можно написать и для всякого другого вектора состояния, скажем для $|\chi\rangle$, но, конечно, с другими коэффициентами, скажем с D_i . Тогда будем иметь

$$| \chi \rangle = \sum_i | i \rangle D_i, \quad (6.11)$$

где D_i — это просто амплитуды $\langle i | \chi \rangle$.

Представим, что мы начали бы с того, что в (6.1) абстрагировались бы от φ . Тогда мы бы имели

$$\langle \chi | = \sum_i \langle \chi | i \rangle \langle i |. \quad (6.12)$$

Вспоминая, что $\langle \chi | i \rangle = \langle i | \chi \rangle^*$, можно записать это в виде

$$\langle \chi | = \sum_i D_i^* \langle i |. \quad (6.13)$$

А теперь интересно вот что: чтобы обратно получить $\langle \chi | \varphi \rangle$, можно просто *перемножить* (6.13) и (6.10). Только, делая это, надо быть внимательным к индексам суммирования, потому что они в разных уравнениях разные. Перепишем

сперва (6.13):

$$\langle \chi | = \sum_i D_i^* \langle i |.$$

Это ничего не меняет. Объединяя с (6.10), получаем

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \sum_{ij} D_j^* \langle j | i \rangle C_i. \quad (6.14)$$

Вспомните, однако, что $\langle j | i \rangle = \delta_{ij}$, так что в сумме останутся только члены с $j = i$. Выйдет

$$\langle \chi | \varphi \rangle = \sum_i D_i^* C_i, \quad (6.15)$$

где, как вы помните, $D_i^* = \langle i | \chi \rangle^* = \langle \chi | i \rangle$, а $C_i = \langle i | \varphi \rangle$. Опять мы являемся свидетелями тесной аналогии со скалярным произведением

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \sum_i A_i B_i.$$

Единственная разница — что D_i нужно комплексно сопрягать. Значит, (6.15) утверждает, что если разложить векторы состояний $\langle \chi |$ и $|\varphi\rangle$ по базисным векторам $|i\rangle$ или $|i\rangle$, то амплитуда перехода из φ в χ дается своего рода скалярным произведением (6.15). А это просто (6.1), записанное в других символах. Мы ходим по кругу, привыкая к новым символам.

Может быть, стоит подчеркнуть, что в то время, как пространственные трехмерные векторы выражаются через *три* ортогональных единичных векторов, базисные векторы $|i\rangle$ квантовомеханических состояний должны пробегать всю совокупность, отвечающую данной задаче. В зависимости от положения вещей в нее может входить два или три, пять или бесконечно много базисных состояний.

Мы говорили также о том, что происходит, когда частицы проходят через прибор. Если мы выпустим частицы в определенном состоянии φ , затем проведем их через прибор, а после проделаем измерение, чтобы посмотреть, находятся ли они в состоянии χ , то результат будет описываться амплитудой

$$\langle \chi | A | \varphi \rangle. \quad (6.16)$$

Такой символ не имеет близкого аналога в векторной алгебре. (Он ближе к тензорной алгебре, но эта аналогия не так уж полезна.) Мы видели в гл. 3 [формула (3.32)], что (6.16) можно переписать так:

$$\langle \chi | A | \varphi \rangle = \sum_{ij} \langle \chi | i \rangle \langle i | A | j \rangle \langle j | \varphi \rangle. \quad (6.17)$$

Это пример двукратного применения основного правила (6.9).

Мы обнаружили также, что если вслед за прибором A поставить другой прибор B , то можно написать

$$\langle \chi | BA | \varphi \rangle = \sum_{ijk} \langle \chi | i \rangle \langle i | B | j \rangle \langle j | A | k \rangle \langle k | \varphi \rangle. \quad (6.18)$$

Это опять-таки следует прямо из предложенного Дираком метода записи уравнения (6.9). Вспомните, что между B и A всегда можно поставить черту (\mid), которая ведет себя совсем как множитель единицы.

Кстати говоря, об уравнении (6.17) можно рассуждать и иначе. Предположим, что мы рассуждаем о частице, попадающей в прибор A в состоянии φ и выходящей из него в состоянии ψ . Мы можем задать себе такой вопрос: можно ли найти такое состояние ψ , чтобы амплитуда перехода от φ к χ тождественно совпадала с амплитудой $\langle \chi | A | \varphi \rangle$? Ответ гласит: да. Мы хотим, чтобы (6.17) заменилось уравнением

$$\langle \chi | \psi \rangle = \sum_i \langle \chi | i \rangle \langle i | \psi \rangle. \quad (6.19)$$

Конечно, этого можно достичь, если взять

$$\langle i | \psi \rangle = \sum_j \langle i | A | j \rangle \langle j | \varphi \rangle = \langle i | A | \varphi \rangle, \quad (6.20)$$

что и определяет собой ψ . «Но оно не определяет собой ψ , — скажете вы, — оно определяет только $\langle i | \psi \rangle$ ». Однако $\langle i | \psi \rangle$ все же определяет ψ ; ведь если у вас есть все коэффициенты, связывающие ψ с базисными состояниями i , то ψ определяется однозначно. И действительно, можно поупражняться с нашими обозначениями и записать (6.20) в виде

$$\langle i | \psi \rangle = \sum_j \langle i | j \rangle \langle j | A | \varphi \rangle. \quad (6.21)$$

А раз это уравнение справедливо при всех i , то можно просто писать

$$| \psi \rangle = \sum_j | j \rangle \langle j | A | \varphi \rangle. \quad (6.22)$$

Теперь мы вправе сказать: «Состояние ψ — это то, что получается, если начать с φ и пройти сквозь аппарат A ».

Еще один, последний пример полезных уловок. Начинаем опять с (6.17). Раз это уравнение соблюдается при любых χ и φ , то их обоих можно сократить! Получаем *

$$A = \sum_{ij} | i \rangle \langle i | A | j \rangle \langle j |. \quad (6.23)$$

* Вы можете сказать, что надо писать не просто A , но $| A |$. Но тогда это будет похоже на символ «абсолютного значения A ». Поэтому обычно черточки опускают. Черточка (\mid) вообще ведет себя очень похоже на множитель единицы.

Что это значит? Только то, что получится, если вернуть на свои места ϕ и χ . В таком виде это уравнение «недокончено» и неполно. Если умножить его «справа» на $|\phi\rangle$, то оно превращается в

$$A |\phi\rangle = \sum_{ij} |i\rangle \langle i| A |j\rangle \langle j| \phi, \quad (6.24)$$

а это снова то же уравнение (6.22). В самом деле, мы бы могли просто убрать из (6.22) все j и написать

$$|\psi\rangle = A |\phi\rangle. \quad (6.25)$$

Символ A — это не амплитуда и не вектор; это вещь особого рода, именуемая *оператором*. Он — нечто, что «оперирует» над состоянием, чтобы создать новое состояние; уравнение (6.25) говорит, что $|\psi\rangle$ — это то, что получается, если A действует на $|\phi\rangle$. Это уравнение тоже нужно считать недоконченным, открытым, пока слева оно не умножится на какое-то «брэ», скажем на $\langle\chi|$, и не обратится в

$$\langle\chi|\psi\rangle = \langle\chi|A|\phi\rangle. \quad (6.26)$$

Оператор A , разумеется, полностью описывается тем, что задается матрица амплитуд $\langle i|A|j\rangle$; ее также пишут в виде A_{ij} — через любую совокупность базисных векторов.

Все эти математические обозначения на самом деле ничего нового не вносят. Единственный резон, почему мы их ввели, — мы хотели показать, как пишутся обрывки уравнений, потому что во многих книжках вы встретите уравнения, написанные в неполном виде, и нет причин вам пугаться, увидев их. Если вы захотите, вы всегда сможете дописать те части, которых не хватает, и получить уравнение, связывающее числа. Оно будет выглядеть более привычно.

Кроме того, как вы увидите, обозначения «брэ» и «кет» очень удобны. Прежде всего мы теперь сможем указывать состояния, задавая их вектор состояния. Когда мы захотим вести речь о состоянии с определенным импульсом p , то скажем: «состояние $|p\rangle$ ». Или будем говорить о некотором произвольном состоянии $|\psi\rangle$. Для единообразия мы всегда, говоря о состоянии, будем употреблять «кет» и писать $|\psi\rangle$. (Конечно, этот выбор совершенно произведен; в равной мере мы могли бы остановиться и на «брэ» $\langle\psi|$.)

§ 3. Каковы базисные состояния мира?

Мы обнаружили, что всякое состояние в мире может быть представлено в виде суперпозиции (линейной комбинации с подходящими коэффициентами) базисных состояний. Вы вправе

спросить, во-первых: *каких именно* базисных состояний? Что ж, возможностей здесь немало. Можно, например, взять проекцию спина на направление z или на некоторое другое направление. Имеется очень-очень много различных *представлений* — аналогов различных *систем координат*, которые можно применять для представления обычных векторов. Затем можно спросить: с *какими* коэффициентами их брать? А это уж зависит от физических обстоятельств. Различные совокупности коэффициентов отвечают разным физическим условиям. Здесь важно знать одну вещь — «пространство», в котором вы работаете, иными словами, знать, что эти базисные состояния означают физически. Так что первое, что вы, вообще говоря, должны знать, — это на что похожи базисные состояния. Тогда вам станет понятно, как описывать положение вещей на языке этих базисных состояний.

Мы хотели бы чуть-чуть заглянуть вперед и немножко поговорить о том, каким скорей всего окажется общее квантовомеханическое описание природы — во всяком случае, каким оно будет, судя по нынешним физическим представлениям. Первым делом надо решиться на тот или другой выбор представления базисных состояний (всегда ведь возможны различные представления). Например, для частицы со спином $1/2$ можно использовать плюс- и минус-состояния относительно оси z . В оси z нет ничего особенного — можете выбрать любую ось, какую вам захочется. Но для единобразия мы всегда будем брать ось z . Начнем со случая одного электрона. Наряду с двумя возможностями для спина (вверх и вниз по оси z) электрон имеет еще импульс. Мы выбираем совокупность базисных состояний, по одному на каждое значение импульса. А что если у электрона нет определенного импульса? Ничего страшного: мы ведь говорим только, каковы базисные состояния. Если у электрона не будет определенного импульса, то у него какая-то амплитуда будет иметь один импульс, а какая-то — другой и т. д. А если он вертится не обязательно вверх спином, то у него есть какая-то амплитуда вертеться при этом импульсе спином вверх, а какая-то — вниз и т. д. Для полного описания электрона, *насколько нам сейчас известно*, требуется только, чтобы базисные состояния описывались *импульсом и спином*. Значит, одна из приемлемых совокупностей базисных состояний $|i\rangle$ для отдельного электрона указывает различные значения импульса и еще направление, куда смотрит спин, — вверх или вниз. Различные смеси амплитуд, т. е. различные сочетания чисел C , описывают различные обстоятельства. Что делает тот или иной электрон, описывается тем, что сообщается, с какой амплитудой у него спин может быть вверх, а с какой — вниз, и при этом импульс будет равен тому или иному числу, и так для всех мыслимых импульсов. Вы те-

перь видите, что требуется для полного квантовомеханического описания отдельного электрона.

А как обстоит дело с системами нескольких электронов? В этих случаях базисные состояния становятся сложнее. Пусть электронов пара. Во-первых, имеются четыре мыслимых состояния по отношению к спину: у обоих электронов спины вверх, или у первого вверх, а у второго вниз, или у первого вниз, а у второго вверх, или у обоих вниз. Кроме того, нужно указать, что у первого электрона импульс p_1 , а у второго импульс p_2 . Базисные состояния для двух электронов требуют указания двух импульсов и двух значков для спина. Для семерки электронов нужно указать семь пар таких чисел.

Если же имеются протон и электрон, то нужно указать направление спина протона и его импульс и направление спина электрона и его импульс. По крайней мере, в каком-то приближении это так. *Мы на самом деле не знаем*, каким является правильное представление для нашего мира. Мы начинаем с предположения, что если указать спин и импульс электрона и то же самое для протона, то получатся базисные состояния; все это очень хорошо, но как быть с «протонными внутренностями»? В самом деле, рассудим следующим образом. В атоме водорода, в котором имеются один протон и один электрон, приходится описывать множество различных базисных состояний, отмечать направления вверх и вниз у спинов протона и электрона и всевозможные импульсы протона и электрона. Затем имеются различные комбинации амплитуд C_i ; все вместе они описывают характер атома водорода в тех или иных состояниях. Но представьте, что мы смотрим на целый атом водорода, как на «частицу». Если бы мы не знали, что он состоит из протона и электрона, то могли бы сказать: «О, я знаю, какие у него базисные состояния — они соответствуют разным импульсам атома водорода». Но это на самом деле не так, ведь у атома водорода есть какие-то внутренние части. Значит, у него могут быть различные состояния с разной внутренней энергией, и описание реальной природы потребовало бы дальнейших подробностей.

То же и с протоном. Вопрос стоит так: есть ли у протона внутренние части? Должны ли мы описывать протон, задавая все мыслимые состояния протонов, мезонов или странных частиц? Мы этого не знаем. И даже хотя мы допускаем, что электрон прост и все, что можно о нем сказать, — это задать его импульс и спин, но ведь не исключена возможность завтра открыть наличие внутри электрона каких-то колесиков и шестеренок. А это будет означать, что наше представление неполно, или неверно, или неточно, так же как и представление атома водорода, описывающее только его импульс, было бы неполным, потому что оно пренебрегало бы тем фактом, что

атом водорода может оказаться возбужденным изнутри. Если электрон тоже может оказаться возбужденным изнутри и превратиться еще во что-то, например в мюон, то его следовало бы описывать не простым заданием состояний новой частицы, а, вероятно, в терминах более сложных внутренних колесиков. Главная сегодняшняя проблема в изучении фундаментальных частиц и состоит в том, чтобы открыть, каковы правильные представления для описания природы. В настоящее время мы полагаем, что для электрона достаточно указывать его импульс и спин. Но мы полагаем также, что существует идеализированный протон, имеющий при себе свои π -мезоны, свои K -мезоны и т. д., и все они должны быть отмечены. Но ведь отмечать несколько десятков частиц смысла мало! Вопрос о том, что есть фундаментальная частица, а что — не фундаментальная, — вопрос, о котором столько сейчас говорится, — это вопрос о том, на что будет похоже окончательное представление в окончательном квантовомеханическом описании мира. Будет ли такая вещь, как импульс электрона, все еще способна описывать природу? И вообще нужно ли весь вопрос ставить именно таким образом! Такие мысли беспрерывно возникают в любом научном исследовании. Во всяком случае, проблема нам понятна — как найти представление? Но ответа мы не знаем. Мы даже не знаем, «в этом ли состоит» проблема или нет; но если проблема в этом, то сперва нужно попытаться узнать, «фундаментальна» или нет каждая отдельная частица.

В нерелятивистской квантовой механике, где энергии не очень высоки и где вы не затрагиваете внутреннего устройства странных частиц и т. п., вы можете делать весьма сложные расчеты, не заботясь об этих деталях. Вы можете просто остановиться на импульсах и спинах электронов и ядер и все будет в порядке. В большинстве химических реакций и других низкоэнергетических событий в ядрах ничего не происходит; они не возбуждаются. Дальше, если атом водорода движется медленно и если он спокойно стукается о другие атомы водорода и ничего внутри него не возбуждается, не излучается, никаких сложностей не происходит, а все остается в основном состоянии энергии внутреннего движения, — в этом случае вы можете пользоваться приближением, при котором об атоме водорода говорят как об отдельном предмете, или частице, не заботясь о том, что он может что-то внутри себя с собой сделать. Это будет хорошим приближением до тех пор, пока кинетическая энергия в любом столкновении будет заметно меньше 10 эв, т. е. энергии, требуемой для того, чтобы возбудить атом водорода до следующего внутреннего состояния. Мы часто будем прибегать к приближению, при котором исключается возможность внутреннего движения, тем самым уменьшая число деталей, которые должны быть учтены в наших базисных состоя-

ниях. Конечно, при этом мы опускаем кое-какие явления, которые проявляются (как правило) при каких-то высших энергиях, но такое приближение сильно упрощает анализ физических задач. Например, можно рассуждать о столкновении двух атомов водорода при низкой энергии (или о любом химическом процессе), не заботясь о том, что атомные ядра могут возбуждаться. Итак, подведем итог. Когда мы вправе пренебречь влиянием любых внутренних возбужденных состояний частицы, мы вправе выбрать базисную совокупность из состояний с определенным импульсом и z -компонентой момента количества движения.

Первой проблемой при описании природы является отыскание подходящего представления для базисных состояний. Но это только начало. Надо еще уметь сказать, что «случится». Если известны «условия» в мире в один момент, то мы хотим знать условия в более поздний момент. Значит, надо также найти законы, определяющие, как все меняется со временем. Мы теперь обращаемся ко второй части основ квантовой механики — к тому, как состояния меняются во времени.

§ 4. Как состояния меняются во времени

Мы уже говорили о том, как отображать ход событий, где мы что-то пропускаем через прибор. Но самый привлекательный, самый удобный для рассмотрения «опыт» состоит в том, что вы останавливаетесь и ждете несколько минут, т. е. вы приготовляете состояние φ и, прежде чем проанализировать его, оставляете его в покое. Быть может, вы оставите его в покое в каком-то электрическом или магнитном поле — все зависит от физических обстоятельств. Во всяком случае, какими бы ни были условия, вы от момента t_1 до момента t_2 оставляете объект на свободе. Допустим, что он выпущен из нашего первого прибора в состоянии φ в момент t_1 . А затем он проходит через «прибор», в котором он находится до момента t_2 . Во время такой «задержки» могут продолжаться различные события, прилагаться внешние силы, — словом, что-то в это время случается. После такой задержки амплитуда того, что этот объект обнаружится в состоянии χ , уже не та же самая, какой она была бы, если бы задержки не было. Так как «ожидание» — это просто частный случай «прибора», то можно описать то, что происходит, задав амплитуду в том же виде, как в уравнении (6.17). Поскольку операция «ожидания» представляет особую важность, мы вместо A обозначим ее U , а чтобы отмечать начальный и конечный моменты t_1 и t_2 , будем писать $U(t_2, t_1)$. Интересующая нас амплитуда — это

$$\langle \chi | U(t_2, t_1) | \varphi \rangle. \quad (6.27)$$

Как и всякая подобная амплитуда, она может быть представлена в той или иной базисной системе в виде

$$\sum_{ij} \langle \chi | i \rangle \langle i | U(t_2, t_1) | j \rangle \langle j | \varphi \rangle. \quad (6.28)$$

Тогда U описывается заданием полной совокупности амплитуд — матрицы

$$\langle i | U(t_2, t_1) | j \rangle. \quad (6.29)$$

Кстати, следует отметить, что матрица $\langle i | U(t_2, t_1) | j \rangle$ могла бы дать гораздо больше всяких деталей, чем нам обычно нужно. Теоретик высокого класса, работающий в физике высоких энергий, рассматривает примерно такие проблемы (потому что именно так обычно ставятся эксперименты): он начинает с двух частиц, скажем с протона и антипротона, налетающих друг на друга из бесконечности. (В лаборатории обычно одна частица поконится, другая же вылетает из ускорителя, который по атомным масштабам пребывает в бесконечности.) Они сталкиваются, и в итоге появляются, скажем, два K -мезона, шесть π -мезонов и два нейтрона с определенными импульсами в определенных направлениях. Какова амплитуда того, что это случится? Математика здесь выглядит так. Состояние φ отмечает спины и импульсы сближающихся частиц. А χ — это сведения о том, что получается в конце. К примеру, с какой амплитудой вы получите шесть мезонов, идущих в таких-то и таких-то направлениях, а два нейтрона, вылетающих вот в этих направлениях и со спинами, торчащими так-то и так-то. Иными словами, χ отмечается заданием всех импульсов, спинов и т. п. конечных продуктов. И вот работа теоретика состоит в том, чтобы подсчитать амплитуду (6.27). Однако на самом деле его интересует только частный случай, когда $t_1 = -\infty$, а $t_2 = +\infty$. (У нас не бывает экспериментальных данных о детальном ходе процесса, известно только, что вошло и что вышло.) Предельный случай $U(t_2, t_1)$ при $t_1 \rightarrow -\infty$ и $t_2 \rightarrow +\infty$ обозначается буквой S ; теоретик нуждается в величине .

$$\langle \chi | S | \varphi \rangle.$$

Или, если пользоваться формой (6.28), ему нужно вычислить матрицу

$$\langle i | S | j \rangle,$$

называемую *S-матрицей*. Стало быть, если вы увидите физика-теоретика, который меряет шагами комнату и говорит: «Мне нужно только вычислить *S-матрицу*», — то вы теперь уже будете понимать, над чем он ломает голову.

Как анализировать *S-матрицу*, т. е. как указать законы для нее,— вопрос интересный. В релятивистской квантовой

механике при высоких энергиях это делается одним способом, в нерелятивистской же квантовой механике — другим, более удобным. (Он годится и в релятивистском случае, но перестает быть таким удобным.) Состоит он в том, чтобы вывести U -матрицу для небольших интервалов времени, т. е. для близких t_2 и t_1 . Если мы сможем найти последовательность таких U для последовательных интервалов времени, то сможем проследить за тем, как все меняется в зависимости от времени. Сразу же ясно, что для теории относительности этот способ не очень хорош, потому что не так уж просто указать, как «одновременно» все всюду выглядит. Но не стоит нам думать об этом; нашей заботой будет только нерелятивистская механика.

Рассмотрим матрицу U для задержки от t_1 до t_3 , где t_3 больше t_2 . Иными словами, возьмем три последовательных момента: t_1 меньше t_2 , t_2 меньше t_3 . Тогда мы утверждаем, что матрица, которая тянется от t_1 до t_3 , получается *перемножением* подряд всего того, что происходит при задержке от t_1 до t_2 , и затем от t_2 до t_3 . Это в точности то же самое, что было с двумя последовательными приборами B и A . Тогда, следуя обозначениям, принятым в гл. 3, § 6, мы можем написать

$$U(t_3, t_1) = U(t_3, t_2) U(t_2, t_1). \quad (6.30)$$

Иначе говоря, можно проанализировать любой интервал времени, если мы умеем анализировать последовательность промежуточных коротких интервалов. Мы просто перемножаем все куски; это и есть способ нерелятивистского анализа квантовой механики.

Итак, задача состоит в том, чтобы узнать матрицу $U(t_2, t_1)$ для бесконечно малого интервала времени — для $t_2 = t_1 + \Delta t$. Спросим себя: если сейчас у нас есть состояние ϕ , то как оно будет выглядеть через бесконечно малое время Δt ? Посмотрим, как это можно расписать. Обозначим состояние в момент t через $|\psi(t)\rangle$ (мы указываем зависимость ψ от времени, чтобы было совершенно ясно, что речь идет об условиях в момент t). Теперь зададим вопрос: каково будет положение вещей через короткое время Δt ? Ответ таков:

$$|\psi(t + \Delta t)\rangle = U(t + \Delta t, t)|\psi(t)\rangle. \quad (6.31)$$

Здесь имеется в виду то же, что и в (6.25), а именно, что амплитуда обнаружить χ в момент $t + \Delta t$ есть

$$\langle \chi | \psi(t + \Delta t) \rangle = \langle \chi | U(t + \Delta t, t) | \psi(t) \rangle. \quad (6.32)$$

Поскольку мы еще не очень хорошо разбираемся в этих абстрактных вещах, то давайте спроектируем наши амплитуды в определенное представление. Умножая обе части (6.31) на $\langle i |$, получаем

$$\langle i | \psi(t + \Delta t) \rangle = \langle i | U(t + \Delta t, t) | \psi(t) \rangle. \quad (6.33)$$

Можно также разложить и $|\psi(t)\rangle$ на базисные состояния и написать

$$\langle i | \psi(t + \Delta t) \rangle = \sum_j \langle i | U(t + \Delta t, t) | j \rangle \langle j | \psi(t) \rangle. \quad (6.34)$$

Понять это можно так. Если через $C_i(t) = \langle i | \psi(t) \rangle$ обозначить амплитуду пребывания в базисном состоянии i в момент t , то можно считать эту амплитуду (помните, это просто число!) меняющейся во времени. Каждое C_i становится функцией времени t . Кроме того, у нас есть информация о том, как амплитуды C_i меняются во времени. Каждая амплитуда в момент $(t + \Delta t)$ пропорциональна всем прочим амплитудам в момент t , умноженным на ряд коэффициентов. Обозначим U -матрицу через U_{ij} , считая, что

$$U_{ij} = \langle i | U | j \rangle.$$

Тогда (6.34) можно записать так:

$$C_i(t + \Delta t) = \sum_j U_{ij}(t + \Delta t, t) C_j(t). \quad (6.35)$$

Вот как будет выглядеть динамика квантовой механики.

Нам пока мало известно об U_{ij} . Мы знаем только, что при Δt , стремящемся к нулю, ничего не должно произойти, просто должно получиться начальное состояние. Значит, $U_{ii} \rightarrow 1$ и $U_{ij} \rightarrow 0$ при $i \neq j$. Иными словами, $U_{ij} \rightarrow \delta_{ij}$ при $\Delta t \rightarrow 0$. Кроме того, мы вполне вправе предположить, что при малых Δt каждый из U_{ij} обязан отличаться от δ_{ij} на величину, пропорциональную Δt ; так что можно писать

$$U_{ij} = \delta_{ij} + K_{ij} \Delta t. \quad (6.36)$$

Однако обычно по историческим и по иным причинам из коэффициентов K_{ij} выносят множитель $(-i/\hbar)^*$; предпочитают писать

$$U_{ij}(t + \Delta t, t) = \delta_{ij} - \frac{i}{\hbar} H_{ij}(t) \Delta t. \quad (6.37)$$

Это, разумеется, то же самое, что и (6.36). Если угодно, это просто определение коэффициентов $H_{ij}(t)$. Члены H_{ij} — это как раз производные по t_2 от коэффициентов $U_{ij}(t_2, t_1)$, вычисляемые при $t_2 = t_1 = t$.

Подставляя в (6.35) этот вид U , получаем

$$C_i(t + \Delta t) = \sum_j \left[\delta_{ij} - \frac{i}{\hbar} H_{ij}(t) \Delta t \right] C_j(t). \quad (6.38)$$

* Здесь небольшая неприятность с обозначениями. В этом множителе i означает мнимую единицу $\sqrt{-1}$, а не индекс i , относящийся к i -му базисному состоянию! Надеемся, это не слишком смутит вас.

Суммируя члены с δ_{ij} , получаем просто $C_i(t)$, что можно перенести в другую сторону уравнения. После деления на Δt мы распознаем в этом производную

$$\frac{C_i(t + \Delta t) - C_i(t)}{\Delta t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_j H_{ij}(t) C_j(t),$$

или

$$i\hbar \frac{d C_i(t)}{dt} = \sum_j H_{ij}(t) C_j(t). \quad (6.39)$$

Вы помните, что $C_i(t)$ — это амплитуда $\langle i | \psi \rangle$ обнаружить состояние ψ в одном из базисных состояний i (в момент t). Значит, уравнение (6.39) сообщает нам, как каждый из коэффициентов $\langle i | \psi \rangle$ меняется со временем. Но это все равно, что сказать, что (6.39) сообщает нам, как со временем меняется состояние ψ , раз мы описываем ψ через амплитуды $\langle i | \psi \rangle$. Изменение ψ со временем описывается через матрицу H_{ij} , которая, конечно, должна включать все то, что мы делали с системой, чтобы вызвать ее изменения. Если мы знаем матрицу H_{ij} , которая содержит в себе всю физику явления и может, вообще говоря, зависеть от времени, то у нас есть полное описание поведения системы во времени. Таким образом, (6.39) — это квантовомеханический закон для динамики мира.

(Нужно сказать, что мы всегда будем выбирать совокупность базисных состояний, которые фиксированы и со временем не меняются. Иногда используют такие базисные состояния, которые сами меняются. Однако это все равно, что пользоваться в механике вращающейся системой координат, а мы не хотим входить в подобные тонкости.)

§ 5. Гамильтонова матрица

Идея, стало быть, заключается в том, что для квантовомеханического описания мира нужно выбрать совокупность базисных состояний i и написать физические законы, задавая матрицу коэффициентов H_{ij} . Тогда у нас будет все, что нужно, — мы сможем отвечать на любой вопрос о том, что случится. Нам остается выучить правила, по которым находят H в соответствии с данной физической обстановкой: какое H отвечает магнитному полю, какое электрическому и т. д. Это самая трудная часть дела. К примеру, для новых странных частиц мы совершенно не представляем, какие H_{ij} употреблять. Иными словами, никто не знает *полного* H_{ij} для всего мира. (Частично трудность заключается в том, что едва ли можно надеяться на открытие H_{ij} , раз никому не известно, каковы базисные состояния!) Мы действительно владеем превосходными приближениями для нерелятивистских явлений и некоторых других

особых случаев. В частности, мы знаем вид H_{ij} , требуемый для движений электронов в атомах — для описания химии. Но мы не знаем полного, истинного H для всей Вселенной.

Коэффициенты H_{ij} называют *гамильтоновой матрицей*, или, короче, просто *гамильтонианом*. (Как получилось, что Гамильтон, работавший в 30-х годах прошлого века, дал свое имя квантовомеханической матрице, — история длинная.) Много лучше было бы называть ее *энергетической матрицей* по причинам, которые станут ясны, когда мы поработаем с ней. Итак, все соплось на гамильтониане. *Как узнать гамильтониан — вот в чем вопрос!*

У гамильтониана есть одно свойство, которое выводится сразу же:

$$H_{ij}^* = H_{ji}. \quad (6.40)$$

Это следует из того, что полная вероятность пребывания системы *хоть в каком-то* состоянии не должна меняться. Если вначале у вас была частица (или любой объект, или весь мир), то с течением времени она пропасть не может. Полная вероятность ее *где-то* найти равна

$$\sum_i |C_i(t)|^2,$$

что не должно меняться со временем. Если это обязано выполняться для любого начального условия ϕ , то уравнение (6.40) тоже должно соблюдаться.

В качестве первого примера возьмем случай, когда физические условия не меняются со временем; мы имеем в виду *внешние* физические условия, так что H не зависит от времени, никаких магнитов никто не включает и не выключает. Выберем также систему, для описания которой хватает одного базисного состояния; такое приближение годится для покоящегося атома водорода и сходных систем. Уравнение (6.39) тогда утверждает, что

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = H_{11} C_1. \quad (6.41)$$

Только одно уравнение — и все! Если H_{11} постоянно, это дифференциальное уравнение легко решается, давая

$$C_1 = (\text{const}) e^{-(i/\hbar) H_{11} t}. \quad (6.42)$$

Так зависит от времени состояние с определенной энергией $E = H_{11}$. Вы видите, почему H_{ij} следовало бы называть *энергетической матрицей*: она обобщает понятие энергии на более сложные случаи.

Вслед за этим, чтобы еще лучше разобраться в смысле уравнений, рассмотрим систему с двумя базисными состояниями.

Тогда (6.39) читается так:

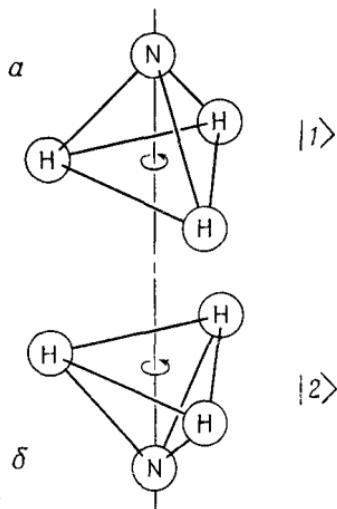
$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = H_{11}C_1 + H_{12}C_2, \quad i\hbar \frac{dC_2}{dt} = H_{21}C_1 + H_{22}C_2. \quad (6.43)$$

Если все H опять не зависят от времени, то эти уравнения легко решить. Для интереса займитесь этим сами, а мы позже еще вернемся к ним. Вот вы уже и можете вести расчеты по квантовой механике, зная об H только то, что оно не зависит от времени!

§ 6. Молекула аммиака

Теперь мы хотим продемонстрировать, как динамическое уравнение квантовой механики может быть использовано для описания какой-то физической обстановки. Мы выбрали интересный и простой пример, в котором, сделав некоторые разумные предположения о гамильтониане, сможем вывести кое-какие важные (и даже практически важные) результаты. Возьмем случай, когда достаточно двух состояний,— это молекула аммиака.

Молекулу аммиака образуют один атом азота и три атома водорода, плоскость которых проходит мимо атома азота, так что молекула имеет форму пирамидки (фиг. 6.1, *a*). Эта молекула, как и всякая другая, обладает бесконечным количеством состояний. Она может вращаться вокруг какой угодно оси; двигаться в любом направлении, выбиривать и т. д. и т. п. Значит, это вовсе не система с двумя состояниями. Но мы сделаем следующее приближение: предположим, что все прочие степени свободы закреплены и не связаны с теми, которые нас сейчас интересуют. Будем считать, что молекула может только вращаться вокруг оси симметрии (как показано на рисунке), что импульс ее переносного движения равен нулю и что ее колебания очень слабы. Это фиксирует все условия, кроме одного: *для атома азота все еще существуют два возможных положения* — он может оказаться по одну сторону плоскости атомов водорода, а может оказаться и по другую (фиг. 6.1). Так что мы будем рассуждать о молекуле, как если бы она была системой с двумя состояниями. Под этим подразумевается, что существуют только два состояния, о которых реально следует заботиться, все же прочее предполагается зафиксированным. Как видите, если даже известно, что молекула вращается вокруг оси с определенным моментом количества движения и что она движется с определенным импульсом и колеблется определенным образом, то все равно еще остаются два допустимых состояния. Будем говорить, что молекула находится в состоянии $|1\rangle$, когда азот «вверху» (фиг. 6.1, *a*) и в состоянии $|2\rangle$, когда азот «внизу» (фиг. 6.1, *b*). Состояния



Фиг. 6.1. Два равноценных геометрических расположения молекулы аммиака.

$|1\rangle$ и $|2\rangle$ в нашем анализе поведения молекулы аммиака можно принять за совокупность базисных состояний. В каждый момент истинное состояние $|\psi\rangle$ молекулы может быть представлено заданием $C_1 = \langle 1|\psi\rangle$ — амплитуды пребывания в состоянии $|1\rangle$ и $C_2 = \langle 2|\psi\rangle$ — амплитуды пребывания в состоянии $|2\rangle$. Тогда, используя (6.8), вектор состояния $|\psi\rangle$ можно записать так:

$$|\psi\rangle = |1\rangle \langle 1|\psi\rangle + |2\rangle \langle 2|\psi\rangle, \quad (6.44)$$

или

$$|\psi\rangle = |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2.$$

Но вот что интересно: если известно, что молекула в определенный момент была в определенном состоянии, то в следующий момент она может уже *не быть* в том же состоянии. Два C -коэффициента меняются со временем в соответствии с уравнениями (6.43), которые верны для любой системы с двумя состояниями. Предположим, к примеру, что вы сделали какое-то наблюдение (или как-то отобрали молекулы), так что *знаете*, что *первоначально* молекула находилась в состоянии $|1\rangle$. Чуть позже уже появляются некоторые шансы засечь ее в состоянии $|2\rangle$. Чтобы узнать, сколь велики эти шансы, нужно решить дифференциальное уравнение, которое говорит, как амплитуды меняются со временем.

Единственная трудность в том, что мы не знаем, что ставить вместо коэффициентов H_{ij} в (6.43). Но кое-что мы все же можем сказать. Предположим, что, если уж молекула оказалась в состоянии $|1\rangle$, тогда у нее не будет никакого шанса когда-либо попасть в состояние $|2\rangle$. И наоборот. Тогда H_{12} и H_{21} будут оба равны нулю, и (6.43) примет вид

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = H_{11}C_1, \quad i\hbar \frac{dC_2}{dt} = H_{22}C_2.$$

Эти уравнения легко решить; получается

$$C_1 = (\text{const}) e^{-(i/\hbar) H_{11}t}, \quad C_2 = (\text{const}) e^{-(i/\hbar) H_{22}t}. \quad (6.45)$$

Это просто амплитуды стационарных состояний с энергиями $E_1 = H_{11}$ и $E_2 = H_{22}$. Еще мы знаем, что у молекулы аммиака состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$ обладают определенной симметрией. Если природа ведет себя более или менее разумно, то матричные элементы H_{11} и H_{22} должны равняться друг другу. Мы обозначим их через E_0 , потому что они соответствуют энергии, которой обладали бы состояния, будь H_{12} и H_{21} равны нулю.

Но (6.45) не отражает того, что на самом деле бывает с аммиаком. Оказывается, что аммиак имеет возможность проткнуть свой азот мимо трех водородов и перебросить его по ту сторону. Это очень трудно: чтобы азоту пройти полпути, нужна немалая энергия. Как же он может пройти на другую сторону, если он не располагает достаточной энергией? Просто имеется некоторая амплитуда того, что он проникнет сквозь энергетический барьер. В квантовой механике разрешается быстро проскачивать через энергетически нелегальную область. Стало быть, существует небольшая амплитуда того, что молекула, начав с состояния $|1\rangle$, перейдет в состояние $|2\rangle$. Коэффициенты H_{12} и H_{21} на самом деле не равны нулю. И опять из симметрии ясно, что они должны быть одинаковы, по крайней мере по величине. И действительно, мы уже знаем, что вообще H_{ij} равняется комплексно сопряженной величине H_{ji} , т. е. они могут отличаться только фазой. Оказывается, как вы потом увидите, что без потери общности можно положить эти коэффициенты равными друг другу. Позднее нам будет удобнее считать их равными отрицательному числу; мы примем поэтому $H_{12} = H_{21} = -A$. Тогда получится следующая пара уравнений:

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = E_0 C_1 - A C_2, \quad (6.46)$$

$$i\hbar \frac{dC_2}{dt} = E_0 C_2 - A C_1. \quad (6.47)$$

Эти уравнения достаточно просты и могут быть решены разным путем. Удобно решать их так. Складывая их, получаем

$$i\hbar \frac{d}{dt} (C_1 + C_2) = (E_0 - A) (C_1 + C_2)$$

с решением

$$C_1 + C_2 = a e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t}. \quad (6.48)$$

Вычитая затем (6.47) из (6.46), получаем

$$i\hbar \frac{d}{dt} (C_1 - C_2) = (E_0 + A) (C_1 - C_2),$$

что дает

$$C_1 - C_2 = b e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}. \quad (6.49)$$

Две постоянные интегрирования мы обозначили a и b ; их надо выбрать так, чтобы получились подходящие начальные условия данной физической задачи. Наконец, складывая и вычитая (6.48) и (6.49), получаем C_1 и C_2 :

$$C_1(t) = \frac{a}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t} + \frac{b}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}, \quad (6.50)$$

$$C_2(t) = \frac{a}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t} - \frac{b}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}. \quad (6.51)$$

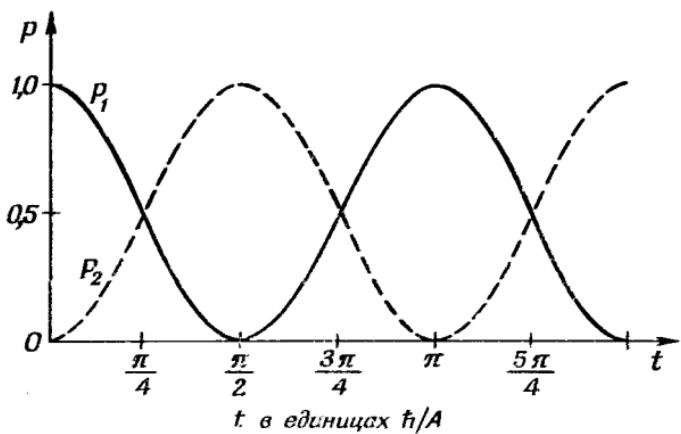
Они отличаются только знаком при втором слагаемом.

Решения-то мы получили, но что они значат? (В квантовой механике трудность не только в том, чтобы получить решения, но и в том, чтобы разобраться в их смысле!) Заметьте, что при $b=0$ оба решения обладают одинаковой частотой $\omega = (E_0 - A)/\hbar$. Если все меняется с одной частотой, это значит, что система пребывает в состоянии с определенной энергией, в данном случае с энергией $(E_0 - A)$. Значит, существует стационарное состояние с такой энергией; в нем обе амплитуды C_1 и C_2 равны друг другу. Мы приходим к выводу, что *молекула амиака обладает определенной энергией $(E_0 - A)$, если для атома азота одинакова амплитуда оказаться «вверху» и «внизу».*

Имеется другое допустимое стационарное состояние, когда $a=0$; тогда обе амплитуды обладают частотой $(E_0 + A)/\hbar$. Значит, имеется другое состояние с определенной энергией $(E_0 + A)$, когда две амплитуды равны, но отличаются знаком: $C_2 = -C_1$. Вот и все состояния с определенной энергией. В следующей главе мы поговорим о состояниях молекулы амиака подробнее; здесь же мы отметим еще только некоторые особенности.

Мы приходим к заключению, что *из-за того*, что имеется некоторая вероятность перескока атома азота из одного положения в другое, энергия молекулы равна не просто E_0 , как можно было ожидать, но обладает *двумя* энергетическими уровнями $(E_0 + A)$ и $(E_0 - A)$. Каждое из возможных состояний молекулы, какую бы энергию оно ни имело, «расщепляется» на два уровня. Мы говорим *«каждое из состояний»*, потому что, как вы помните, мы выбрали какое-то определенное состояние вращения с определенной внутренней энергией и т. д. И для *каждых мыслимых условий* подобного рода возникает (из-за возможности переворота молекулы) пара энергетических уровней.

Теперь поставим следующий вопрос. Пусть мы знаем, что при $t=0$ молекула находится в состоянии $|1\rangle$, т. е. что $C_1(0)=1$



Фиг. 6.2. P_1 — вероятность того, что молекула аммиака, находившаяся при $t=0$ в состоянии $|1\rangle$, будет обнаружена в момент t тоже в состоянии $|1\rangle$; P_2 — вероятность того, что она будет обнаружена в состоянии $|2\rangle$.

и $C_2(0)=0$. Какова вероятность того, что молекула будет обнаружена в момент t в состоянии $|2\rangle$ или же что она окажется в этот момент в состоянии $|1\rangle$? Напи начальные условия говорят нам, какими должны быть a и b в (6.50) и (6.51). Полагая $t=0$, имеем

$$C_1(0) = \frac{a+b}{2} = 1, \quad C_2(0) = \frac{a-b}{2} = 0.$$

Значит, $a=b=1$. Подставляя их в формулы для $C_1(t)$ и $C_2(t)$ и вынося общий множитель, получаем

$$C_1(t) = e^{-(i/\hbar) E_0 t} \left(\frac{e^{(i/\hbar) At} + e^{-(i/\hbar) At}}{2} \right),$$

$$C_2(t) = e^{-(i/\hbar) E_0 t} \left(\frac{e^{(i/\hbar) At} - e^{-(i/\hbar) At}}{2} \right).$$

Это можно переписать так:

$$C_1(t) = e^{-(i/\hbar) E_0 t} \cos \frac{At}{\hbar}, \quad (6.52)$$

$$C_2(t) = i e^{-(i/\hbar) E_0 t} \sin \frac{At}{\hbar}. \quad (6.53)$$

Величина обеих амплитуд гармонически изменяется во времени.

Вероятность того, что молекула будет обнаружена в состоянии $|2\rangle$ в момент t , равна квадрату модуля $C_2(t)$:

$$|C_2(t)|^2 = \sin^2 \frac{At}{\hbar}. \quad (6.54)$$

Она, как и следует, начинается с нуля, растет до единицы и затем колеблется вперед и назад между нулем и единицей, как показано на кривой, обозначенной P_2 , на фиг. 6.2. Вероятность оставаться в состоянии $|1\rangle$ тоже, конечно, не остается равной единице. Она «перекачивается» во второе состояние до тех пор, пока вероятность увидеть молекулу в первом состоянии не обратится в нуль, как показано на кривой P_1 фиг. 6.2. Вероятность попросту переливается туда и обратно между этими двумя состояниями.

Еще раньше мы видели, что бывает, если качаются два одинаковых маятника, слегка связанные друг с другом [см. гл. 49 (вып. 4)]. Когда мы отводим в сторону один из них и отпускаем, он колеблется, но затем постепенно начинает колебаться другой и вскоре забирает себе всю энергию. Затем процесс обращается, и энергию отбирает первый маятник. В точности то же самое происходит и здесь. Скорость, с какой происходит обмен энергией (быстрота просачивания «колебаний»), зависит от связи между маятниками. Кроме того, как вы помните, при двух маятниках существуют два определенных типа движений (каждый с определенной частотой), которые мы назвали фундаментальными типами колебаний. Если отклонить оба маятника вместе, они колеблются с одной частотой. Если же отклонить один в одну сторону, а другой — в другую, то появляется иной стационарный тип колебаний и тоже с определенной частотой.

С тем же мы встретились и сейчас — молекула аммиака математически походит на пару маятников. Существуют две частоты $(E_0 + A)/\hbar$ и $(E_0 - A)/\hbar$, при которых они колеблются либо разом, либо навстречу друг другу.

Сходство с маятником ненамного глубже принципа, что у одинаковых уравнений и решения одинаковы. Линейные уравнения для амплитуд (6.39) очень похожи на линейные уравнения для гармонических осцилляторов. (В действительности именно этой причине обязана успехом наша классическая теория показателя преломления, в которой квантовомеханический атом мы заменили гармоническим осциллятором, хотя классически неразумно говорить об электронах, циркулирующих вокруг ядра.) Толкнув атом азота в одну сторону, вы получите *суперпозицию* этих двух колебаний и тем самым своеобразные биения, потому что система *не будет находиться* в том или ином состоянии с определенной частотой. Однако расщепление уровней энергии молекулы аммиака — это строго квантовомеханический эффект.

Расщепление уровней энергии молекулы аммиака имеет важные практические применения, которые мы опишем в следующей главе. Наконец-то у нас будет пример практической физической задачи, которую мы сможем понять при помощи квантовой механики!

АММИАЧНЫЙ МАЗЕР

§ 1. Состояния молекулы аммиака

В этой главе мы хотим обсудить применение квантовой механики в одном практическом устройстве — в аммиачном мазере. Вас может удивить, отчего это мы бросаем на полпути наше изложение формального аппарата квантовой механики и обращаемся к частной задаче. Но позже вы увидите, что многие черты этой частной задачи сплошь и рядом встречаются и в общей теории квантовой механики, так что детальное изучение задачи многому нас научит. Аммиачный мазер — это устройство для генерирования электромагнитных волн. Его действие основано на свойствах молекулы аммиака, о которых вкратце говорилось в предыдущей главе. Поэтому сначала мы подведем итоги тому, что нам уже известно.

Молекула аммиака имеет много состояний. Но мы будем считать ее системой с двумя состояниями (двухровневой); сейчас нас интересует лишь то, что бывает, когда молекула находится в любом заданном состоянии вращения или поступательного движения. Физическую модель этих двух состояний можно наглядно представить себе следующим образом. Если вращать молекулу аммиака вокруг оси, проведенной через атом азота перпендикулярно плоскости атомов водорода, как показано на фиг. 7.1, мы обнаружим, что существуют два сорта состояний, которые не переходят друг в друга при таких поворотах и отличаются положением атома азота. Азот может быть либо по одну сторону плоскости атомов водорода, либо по другую. Эти два состояния мы обозначаем $|1\rangle$ и $|2\rangle$. Их мы выберем в качестве совокупности базисных состояний в нашем анализе поведения молекулы аммиака.

§ 1. Состояния молекулы аммиака

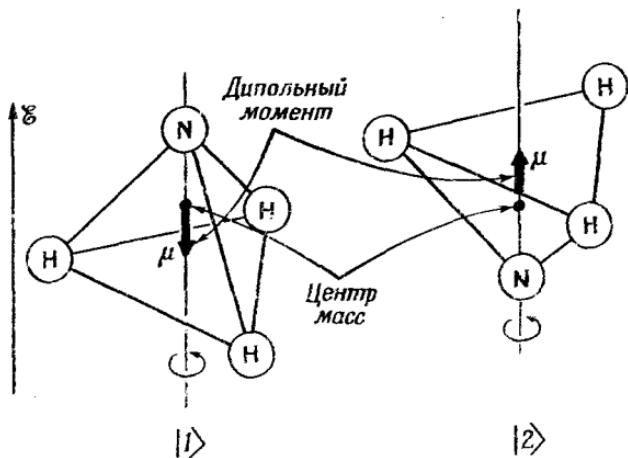
§ 2. Молекула в статическом электрическом поле

§ 3. Переходы в поле, зависящем от времени

§ 4. Переходы при релаксации

§ 5. Переходы вне релаксации

§ 6. Поглощение света



Фиг. 7.1. Физическая модель двух базисных состояний молекулы аммиака.

Электрические дипольные моменты этих состояний равны μ .

В системе с двумя базисными состояниями любое состояние $|\psi\rangle$ системы всегда может быть описано линейной комбинацией двух базисных состояний; это значит, что существует определенная амплитуда C_1 быть в одном базисном состоянии и амплитуда C_2 быть в другом. Вектор состояния $|\psi\rangle$ можно записать в виде

$$|\psi\rangle = |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2, \quad (7.1)$$

где

$$C_1 = \langle 1 | \psi \rangle \quad \text{и} \quad C_2 = \langle 2 | \psi \rangle.$$

Эта пара амплитуд меняется со временем согласно нашим гамильтоновским уравнениям — уравнениям (6.43). Используя симметрию двух состояний молекулы аммиака, мы полагаем $H_{11}=H_{22}=E_0$ и $H_{12}=H_{21}=-A$ и получаем такое решение [см. (6.50) и (6.51)]:

$$C_1 = \frac{a}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t} + \frac{b}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}, \quad (7.2)$$

$$C_2 = \frac{a}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t} - \frac{b}{2} e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}. \quad (7.3)$$

Кинем теперь на эти решения более внимательный взгляд. Пусть сперва молекула была поставлена в состояние $|\psi_H\rangle$, для которого коэффициент b был равен нулю. Тогда при $t=0$ амплитуды окажутся в состояниях $|1\rangle$ и $|2\rangle$ одинаковы и останутся такими все время. Их фазы обе меняются во времени одинаково, с частотой $(E_0 - A)/\hbar$. И точно так же, если бы мы поставили молекулу в состояние $|\psi_I\rangle$, для которого $a=0$,

амплитуда C_2 равнялась бы C_1 с минусом, и это соотношение сохранилось бы навсегда — обе амплитуды менялись бы теперь во времени с частотой $(E_0 + A)/\hbar$. Это все состояния, для которых связь между C_1 и C_2 не зависит от времени; других возможностей нет.

Мы нашли два частных решения, в которых амплитуды не меняются по величине и, более того, фазы меняются с одинаковой частотой. Это *стационарные состояния* по определению, данному в гл. 5, § 1, т. е. *состояния с определенной энергией*. Состояние $|\psi_{II}\rangle$ обладает энергией $E_{II} = E_0 - A$, а состояние $|\psi_I\rangle$ — энергией $E_I = E_0 + A$. Кроме этих, никаких стационарных состояний не существует, т. е. мы обнаруживаем, что у молекулы есть два уровня энергии, отличающиеся на $2A$. (Подразумеваются, конечно, два уровня энергии для заданного состояния колебания и вращения, о которых говорилось в наших исходных допущениях.) *

Если бы азот не мог перескакивать вверх или вниз, нам пришлось бы принять A равным нулю, и оба энергетических уровня (с энергией E_0) налезали бы один на другой. Истинные уровни не таковы; их среднее значение E_0 , но они разведены на $\pm A$, т. е. промежуток между энергиями двух состояний равен $2A$. Поскольку A на самом деле мало, то и разница в энергиях очень мала.

Чтобы возбудить электрон внутри атома, требуются довольно высокие энергии, нужны фотоны оптического или ультрафиолетового диапазона. Чтобы возбудить вибрации молекул, требуются инфракрасные фотоны. Если речь идет о возбуждении *вращений*, различия в энергиях состояний соответствуют фотонам в далекой инфракрасной области. Но разность энергий $2A$ меньше их всех, меньше инфракрасных энергий, она приходится на микроволновой диапазон. Опытным путем было найдено, что существует пара уровней энергии с промежутком 10^{-4} эв, что отвечает частоте $24\,000$ $M\text{гц}$. Это, очевидно, означает, что $2A = hf$, где $f = 24\,000$ $M\text{гц}$ (отвечает волне длиной $1\frac{1}{4}$ см). Значит, перед нами молекула с переходами, которые вызывают испускание микроволн, а не свет в обычном смысле.

Для дальнейшей работы нам понадобится немногого более удобное описание этих двух состояний с определенной энергией. Представим, что мы построили амплитуду C_{II} из суммы двух чисел C_1 и C_2 :

$$C_{II} = C_1 + C_2 = \langle 1 | \Phi \rangle + \langle 2 | \Phi \rangle. \quad (7.4)$$

Что бы это могло означать? Очень просто: это амплитуда того,

* В дальнейшем полезно (и читая, и произнося вслух) отличать арабские 1 и 2 и римские I и II. Мы считаем, что удобно для арабских цифр резервировать названия «один» и «два», а I и II читать как «первый», «второй».

что состояние $|\Phi\rangle$ окажется в новом состоянии $|II\rangle$, в котором амплитуды первоначальных базисных состояний равны между собой. Иначе говоря, когда мы пишем $C_{II} = \langle II | \Phi \rangle$, то мы вправе абстрагироваться в уравнении (7.4) от $|\Phi\rangle$, поскольку оно выполняется при любых Φ , и писать

$$\langle II | = \langle I | + \langle 2 |;$$

это означает то же самое, что и

$$|II\rangle = |I\rangle + |2\rangle. \quad (7.5)$$

Амплитуда того, что состояние $|II\rangle$ окажется в состоянии $|I\rangle$, равна

$$\langle I | II \rangle = \langle I | I \rangle + \langle I | 2 \rangle,$$

а это, конечно, равняется просто единице, поскольку и $|I\rangle$, и $|2\rangle$ суть базисные состояния. И амплитуда обнаружения состояния $|II\rangle$ в состоянии $|2\rangle$ тоже равна единице, так что у состояния $|II\rangle$ одинаковы амплитуды оказаться в каждом из базисных состояний $|I\rangle$ и $|2\rangle$.

Но тут всплывает новая трудность. У состояния $|II\rangle$ полная вероятность оказаться *то ли в одном* базисном состоянии, *то ли в другом* получается больше единицы. Но это всего лишь означает, что вектор состояния неудачно «отнормирован». Чтобы исправить дело, надо вспомнить, что всегда для любого состояния обязано быть $\langle II | II \rangle = 1$. Использовав общее соотношение

$$\langle \chi | \Phi \rangle = \sum_i \langle \chi | i \rangle \langle i | \Phi \rangle,$$

полагая, что и Φ , и χ суть состояние II , и суммируя по базисным состояниям $|I\rangle$ и $|2\rangle$, получаем

$$\langle II | II \rangle = \langle II | I \rangle \langle I | II \rangle + \langle II | 2 \rangle \langle 2 | II \rangle.$$

Это даст, как положено, единицу, если мы изменим наше определение C_{II} [см. уравнение (7.4)] и примем

$$C_{II} = \frac{1}{\sqrt{2}} [C_1 + C_2].$$

Таким же путем можно построить и амплитуду

или

$$C_I = \frac{1}{\sqrt{2}} [C_1 - C_2],$$

$$C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle I | \Phi \rangle - \langle 2 | \Phi \rangle]. \quad (7.6)$$

Эта амплитуда есть проекция состояния $|\Phi\rangle$ на новое состояние $|I\rangle$, обладающее амплитудами противоположного знака, для пребывания в состояниях $|I\rangle$ и $|2\rangle$. А именно (7.6) оз-

начает то же самое, что и

$$\langle I | = \frac{1}{\sqrt{2}} [\langle 1 | - \langle 2 |],$$

или

$$| I \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [| 1 \rangle - | 2 \rangle], \quad (7.7)$$

откуда следует

$$\langle I | I \rangle = - \langle 2 | I \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Зачем все это нужно? С какой целью все это делается? Дело в том, что состояния $| I \rangle$ и $| II \rangle$ могут быть приняты за новую совокупность базисных состояний, особенно подходящую для описания стационарных состояний молекулы аммиака. Вы помните, что требования к совокупности базисных состояний были таковы:

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

Мы уже сами сделали так, чтобы было

$$\langle I | I \rangle = \langle II | II \rangle = 1.$$

Из (7.5) и (7.7) легко вывести, что и

$$\langle I | II \rangle = \langle II | I \rangle = 0.$$

Амплитуды $C_I = \langle I | \Phi \rangle$ и $C_{II} = \langle II | \Phi \rangle$ того, что любое состояние $|\Phi\rangle$ окажется в одном из наших новых базисных состояний $|I\rangle$ и $|II\rangle$, обязаны также удовлетворять гамильтонову уравнению вида (6.39). И действительно, если мы просто вычтем друг из друга два уравнения (7.2) и (7.3) и продифференцируем по t , то убедимся, что

$$i\hbar \frac{dC_I}{dt} = (E_0 + A) C_I = E_I C_I. \quad (7.8)$$

А взяв сумму (7.2) и (7.3), увидим

$$i\hbar \frac{dC_{II}}{dt} = (E_0 - A) C_{II} = E_{II} C_{II}. \quad (7.9)$$

Если за базисные состояния взять $|I\rangle$ и $|II\rangle$, то гамильтонова матрица очень проста:

$$\begin{aligned} H_{I, I} &= E_I, & H_{I, II} &= 0, \\ H_{II, I} &= 0, & H_{II, II} &= E_{II}. \end{aligned}$$

Заметьте, что каждое из уравнений (7.8) и (7.9) выглядит очень похоже на то, что получалось в гл. 6, § 6, для уравнения системы с одним состоянием. Они дают простую экспоненциальную зависимость от времени, отвечающую определенной энергии.

С ростом времени амплитуды пребывания в каждом из состояний ведут себя независимо.

Найденные нами раньше стационарные состояния $|\psi_I\rangle$ и $|\psi_{II}\rangle$ тоже являются, конечно, решениями уравнений (7.8) и (7.9). У состояния $|\psi_I\rangle$ (для которого $C_1 = -C_2$)

$$C_I = e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}, \quad C_{II} = 0. \quad (7.10)$$

А у состояния $|\psi_{II}\rangle$ (для которого $C_1 = C_2$)

$$C_I = 0, \quad C_{II} = e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t}. \quad (7.11)$$

Пусть мы теперь умножили (7.10) на вектор состояния $|I\rangle$; тогда получится

$$|I\rangle \langle I | \psi_I \rangle = |I\rangle e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}.$$

Вспомним, однако, что $|I\rangle \langle I| = 1$; значит, это одно и то же, что сказать

$$|\psi_I\rangle = |I\rangle e^{-(i/\hbar)(E_0 + A)t}.$$

Иначе говоря, вектор состояния стационарного состояния $|\psi_I\rangle$ не отличается от вектора состояния базисного состояния $|I\rangle$ ничем, кроме экспоненциального множителя, связанного с энергией состояния. И действительно, при $t=0$

$$|\psi_I\rangle = |I\rangle;$$

физическая конфигурация у состояния $|I\rangle$ та же самая, что и у стационарного состояния с энергией $E_0 + A$. Точно так же для второго стационарного состояния получается

$$|\psi_{II}\rangle = |II\rangle e^{-(i/\hbar)(E_0 - A)t}.$$

Состояние $|II\rangle$ — это просто стационарное состояние с энергией $E_0 - A$ при $t=0$. Стало быть, оба наших новых базисных состояния $|I\rangle$ и $|II\rangle$ физически имеют вид состояний с определенной энергией, но с изъятым экспоненциальным временным множителем, так что они могут быть приняты за базисные состояния, не зависящие от времени. (В дальнейшем нам будет удобно не отличать стационарные состояния $|\psi_I\rangle$ и $|\psi_{II}\rangle$ от их базисных состояний $|I\rangle$ и $|II\rangle$, ведь различаются они только очевидными временными множителями.)

Подведем итог. Векторы состояний $|I\rangle$ и $|II\rangle$ — это пара базисных векторов, приспособленных для описания состояний молекулы аммиака с определенной энергией. Они связаны с нашими исходными базисными векторами формулами

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\rangle - |2\rangle], \quad |II\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\rangle + |2\rangle]. \quad (7.12)$$

Амплитуды пребывания в $|I\rangle$ и $|II\rangle$ связаны с C_1 и C_2 формулами

$$C_I = \frac{1}{\sqrt{2}} [C_1 - C_2], \quad C_{II} = \frac{1}{\sqrt{2}} [C_1 + C_2] \quad (7.13)$$

Всякое состояние может быть представлено линейной комбинацией $|1\rangle$ и $|2\rangle$ (с коэффициентами C_1 и C_2) или линейной комбинацией базисных состояний с определенной энергией $|I\rangle$ и $|II\rangle$ (с коэффициентами C_I и C_{II}). Итак,

$$|\Phi\rangle = |I\rangle C_1 + |2\rangle C_2,$$

или

$$|\Phi\rangle = |I\rangle C_I + |II\rangle C_{II}.$$

Вторая формула дает нам амплитуды обнаружить состояние $|\Phi\rangle$ в состоянии с энергией $E_I = E_0 + A$ или в состоянии с энергией $E_{II} = E_0 - A$.

§ 2. Молекула в статическом электрическом поле

Если молекула аммиака находится в любом из двух состояний определенной энергии, а мы приложим к ней возмущение с частотой ω , такой, что $\hbar\omega = E_I - E_{II} = 2A$, то система может перейти из нижнего состояния в верхнее. Или она может перейти из верхнего в нижнее и испустить фотон. Но для возбуждения таких переходов у нас должна быть физическая связь с состояниями — возможность возмущать систему. Должен существовать какой-то внешний механизм влияния на состояния, нечто вроде электрического или магнитного поля. В нашем частном случае эти состояния чувствительны к электрическому полю. На очереди, стало быть, у нас теперь проблема поведения молекулы аммиака во внешнем электрическом поле.

Для разбора этого поведения вернемся опять к первоначальной базисной системе $|1\rangle$ и $|2\rangle$ вместо $|I\rangle$ и $|II\rangle$. Предположим, что имеется электрическое поле, направленное поперек плоскости атомов водорода. Пренебрежем на мгновение возможностью переброса атома азота вверх или вниз и зададим вопрос: верно ли, что энергия этой молекулы в обоих положениях атома азота будет одинаковой? Вообще говоря, нет. Электроны стремятся к тому, чтобы находиться ближе к ядру азота, чем к ядрам водорода, так что водороды оказываются слегка положительно заряженными. Насколько — это зависит от деталей расположения электронов. Каково это распределение, точно представить очень трудно, но, во всяком случае, окончательный результат состоит в том, что у молекулы аммиака есть электрический дипольный момент, как показано на фиг. 7.1. С его помощью можно продолжить дальнейший анализ, не интересуясь деталями направлений или величин смещений зарядов. Впрочем, чтобы наши обозначения не отличались от общепринятых, предположим, что электрический дипольный момент равен μ и направлен от атома азота поперек плоскости атомов водорода.

Далее, когда азот перепрыгивает с одной стороны на другую, то центр масс не перемещается, а электрический дипольный момент переворачивается. В результате энергия в электрическом поле \mathcal{E} будет зависеть от ориентации молекулы *. При сделанном только что допущении потенциальная энергия будет выше тогда, когда атом азота будет удален от плоскости водородов в направлении поля, и ниже, когда он удален в обратную сторону; промежуток между обеими энергиями будет равен $2\mu\mathcal{E}$.

До этого места мы вынуждены были делать предположения о том, чему равны E_0 и A , не зная, как подсчитать их. В соответствии со строгой физической теорией обязана существовать возможность вычисления этих констант, если известны положения и движения всех ядер и электронов. Но никто никогда не делал этого. В систему входит десяток электронов и четверка ядер, и задача чересчур сложна. Факт остается фактом: о молекуле этой никто не знает больше того, что знаем мы с вами. И все, что всякий может о ней сказать,— что в электрическом поле энергия двух состояний отличается и разность энергий пропорциональна электрическому полю. Коэффициент пропорциональности мы обозначили 2μ , но его величина должна определяться экспериментально. Можно еще сказать, что молекула имеет амплитуду A перевернуться, но и она должна измеряться экспериментально. Никто не укажет нам точных теоретических значений μ и A , потому что расчеты уж слишком сложны, чтобы честно их проделать.

Для молекулы аммиака в электрическом поле наше описание придется изменить. Если игнорировать амплитуду переброса молекулы из одной конфигурации в другую, то энергии двух состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ обязаны быть равны ($E_0 \pm \mu\mathcal{E}$). Следуя процедуре, принятой в предыдущей главе, мы примем

$$H_{11} = E_0 + \mu\mathcal{E}, \quad H_{22} = E_0 - \mu\mathcal{E}. \quad (7.14)$$

Кроме того, предположим, что при интересующих нас электрических полях сами поля неказываются заметно на геометрии молекулы и, стало быть, на амплитуде того, что атом азота перепрыгнет из одного положения в другое. Поэтому можно принять, что H_{12} и H_{21} не изменились, т. е.

$$H_{12} = H_{21} = -A. \quad (7.15)$$

Теперь с этими новыми значениями H_{ij} надо решать гамильтоновы уравнения (6.43). Мы могли бы их решить просто, как делали это прежде, но поскольку нам не раз, видимо, предста-

* Очень жаль, но нам придется ввести новое обозначение. Раз буквы r и E заняты у нас импульсом и энергией, то мы поостережемся опять обозначать ими дипольный момент и электрическое поле. Напомним, что в этом параграфе μ означает электрический дипольный момент.

вится случай решать системы с двумя состояниями, то давайте уж решим их раз и навсегда в общем случае произвольного H_{ij} , считая только, что со временем оно не меняется.

Мы ищем общее решение пары гамильтоновых уравнений

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = H_{11}C_1 + H_{12}C_2, \quad (7.16)$$

$$i\hbar \frac{dC_2}{dt} = H_{21}C_1 + H_{22}C_2. \quad (7.17)$$

Это линейные дифференциальные уравнения с постоянными коэффициентами. Значит, всегда можно найти решения, являющиеся экспоненциальными функциями независимой переменной t . Сперва отыщем решения, в которых C_1 и C_2 одинаково зависят от времени; возьмем пробные функции

$$C_1 = a_1 e^{-i\omega t}, \quad C_2 = a_2 e^{-i\omega t}.$$

Поскольку это решение отвечает состоянию с энергией $E = \hbar\omega$, то можно прямо написать

$$C_1 = a_1 e^{-(i/\hbar)Et}, \quad (7.18)$$

$$C_2 = a_2 e^{-(i/\hbar)Et}, \quad (7.19)$$

где E пока неизвестна и должна быть определена так, чтобы дифференциальные уравнения (7.16) и (7.17) выполнялись.

При подстановке C_1 и C_2 из (7.18) и (7.19) в дифференциальные уравнения (7.16) и (7.17) производные дают просто $-iE/\hbar$, умноженное на C_1 или C_2 , так что слева остается попросту EC_1 или EC_2 . Сокращая общие экспоненциальные множители, получаем

$$Ea_1 = H_{11}a_1 + H_{12}a_2, \quad Ea_2 = H_{21}a_1 + H_{22}a_2,$$

или после перестановки членов

$$(E - H_{11})a_1 - H_{12}a_2 = 0, \quad (7.20)$$

$$-H_{21}a_1 + (E - H_{22})a_2 = 0. \quad (7.21)$$

У такой системы однородных алгебраических уравнений не-нулевые решения для a_1 и a_2 будут лишь тогда, когда определитель, составленный из коэффициентов при a_1 и a_2 , равен нулю, т. е. если

$$\begin{vmatrix} E - H_{11} & -H_{12} \\ -H_{21} & E - H_{22} \end{vmatrix} = 0. \quad (7.22)$$

Но когда уравнений два и неизвестных тоже два, то можно обойтись и без столь возвышенных представлений. Каждое из уравнений (7.20) и (7.21) дает отношение двух коэффициентов a_1 и a_2 , и эти два отношения должны быть равны. Из (7.20)

мы имеем

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{H_{12}}{E - H_{11}}, \quad (7.23)$$

а из (7.21)

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{E - H_{22}}{H_{21}}. \quad (7.24)$$

Приравнивая эти отношения, получаем, что E должно удовлетворять равенству

$$(E - H_{11})(E - H_{22}) - H_{12}H_{21} = 0.$$

То же получилось бы и из (7.22). В любом случае для E получается квадратное уравнение с двумя решениями:

$$E = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}}. \quad (7.25)$$

Энергия E может иметь два значения. Заметьте, что оба они *вещественны*, потому что H_{11} и H_{22} вещественны, а $H_{12}H_{21}$, равное $H_{12}H_{12}^* = |H_{12}|^2$, тоже вещественно, да к тому же положительно.

Пользуясь тем же соглашением, что и раньше, обозначим большую энергию E_I , а меньшую E_{II} . Имеем

$$E_I = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} + \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}}, \quad (7.26)$$

$$E_{II} = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} - \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}}. \quad (7.27)$$

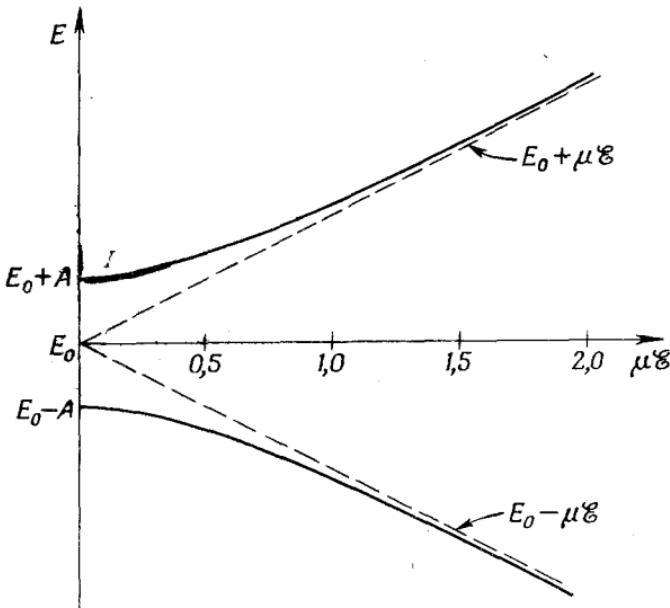
Подставив каждую из этих энергий по отдельности в (7.18) и (7.19), получим амплитуды для двух стационарных состояний (состояний определенной энергии). Если нет каких-либо внешних возмущений, то система, первоначально бывшая в одном из этих состояний, останется в нем навсегда, у нее только фаза будет меняться.

Наши результаты можно проверить на двух частных случаях. Если $H_{12} = H_{21} = 0$, то получается $E_I = H_{11}$ и $E_{II} = H_{22}$. А это бесспорно правильно, потому что тогда уравнения (7.16) и (7.17) не связаны и каждое представляет состояние с энергией H_{11} и H_{22} . Далее, положив $H_{11} = H_{22} = E_0$ и $H_{21} = H_{12} = -A$, придем к найденному выше решению:

$$E_I = E_0 + A \quad \text{и} \quad E_{II} = E_0 - A.$$

В общем случае два решения E_I и E_{II} относятся к двум состояниям; мы их опять можем назвать состояниями

$$|\Psi_I\rangle = |I\rangle e^{-(i/\hbar)E_I t} \quad \text{и} \quad |\Psi_{II}\rangle = |II\rangle e^{-(i/\hbar)E_{II} t}.$$



Ф и г. 7.2. Уровни энергии молекулы аммиака в электрическом поле.

Кривые построены по формулам (7.30): $E = E_0 \pm \sqrt{A^2 + \mu^2 \epsilon^2}$

У этих состояний C_1 и C_2 будут даваться уравнениями (7.18) и (7.19), где a_1 и a_2 еще подлежат определению. Их отношение дается либо формулой (7.23), либо (7.24). Они должны также удовлетворять еще одному условию. Если известно, что система находится в одном из стационарных состояний, то сумма вероятностей того, что она окажется в $|1\rangle$ или $|2\rangle$, должна равняться единице. Следовательно,

$$|C_1|^2 + |C_2|^2 = 1, \quad (7.28)$$

или, что то же самое,

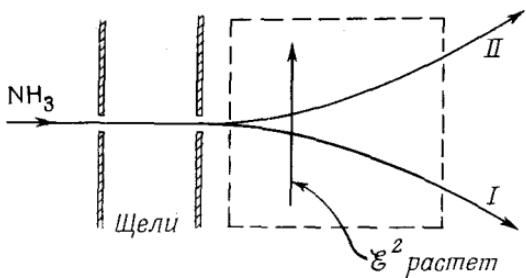
$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1. \quad (7.29)$$

Эти условия не определяют a_1 и a_2 однозначно: остается еще произвол в фазе, т. е. в множителе типа $e^{i\delta}$. Хотя для a можно выписать общие решения *, но обычно удобнее вычислять их в каждом отдельном случае.

Вернемся теперь к нашему частному примеру молекулы аммиака в электрическом поле. Пользуясь значениями H_{11} ,

* Например, как легко убедиться, одно из допустимых решений имеет вид

$$a_1 = \frac{H_{12}}{[(E - H_{11})^2 + H_{12}H_{21}]^{1/2}}, \quad a_2 = \frac{E - H_{11}}{[(E - H_{11})^2 + H_{12}H_{21}]^{1/2}}.$$



Фиг. 7.3. Пучок молекул аммиака может быть разделен электрическим полем, в котором E^2 обладает градиентом, перпендикулярным пучку.

H_{22} и H_{11} из (7.14) и (7.15), мы получим для энергий двух стационарных состояний выражения

$$E_I = E_0 + \sqrt{A^2 + \mu^2 E^2}, \quad E_{II} = E_0 - \sqrt{A^2 + \mu^2 E^2}. \quad (7.30)$$

Эти две энергии как функции напряженности E электрического поля изображены на фиг. 7.2. Когда электрическое поле нуль, то энергии, естественно, обращаются в $E_0 \pm A$. При наложении электрического поля расщепление уровней растет. Сперва при малых E оно растет медленно, но затем может стать пропорциональным E . (Эта линия — гипербола.) В сверхсильных полях энергии попросту равны

$$E_I = E_0 + \mu E = H_{11}, \quad E_{II} = E_0 - \mu E = H_{22}. \quad (7.31)$$

Тот факт, что у азота существует амплитуда переброса вверх — вниз, малосуществен, когда энергии в этих двух положениях сильно отличаются. Это интересный момент, к которому мы позже еще вернемся.

Теперь мы наконец готовы понять действие аммиачного мазера. Идея в следующем. Во-первых, мы находим способ отделения молекул в состоянии $|I\rangle$ от молекул в состоянии $|II\rangle$ *. Затем молекулы в высшем энергетическом состоянии $|I\rangle$ пропускаются через полость, у которой резонансная частота равна 24 000 Гц. Молекулы могут оставить свою энергию полости (способ будет изложен позже) и покинуть полость в состоянии $|II\rangle$. Каждая молекула, совершившая такой переход, передает полости энергию $E = E_I - E_{II}$. Энергия, отобранная у молекул, проявится в виде электрической энергии полости.

Как же разделить два молекулярных состояния? Один способ такой. Аммиачный газ выпускается тонкой струйкой и проходит через пару щелей, создающих узкий пучок (фиг. 7.3).

* Теперь мы опять будем писать $|I\rangle$ и $|II\rangle$ вместо $|\psi_I\rangle$ и $|\psi_{II}\rangle$. Вы должны вспомнить, что настоящие состояния $|\psi_I\rangle$ и $|\psi_{II}\rangle$ суть энергетические базисные состояния, умноженные на соответствующий экспоненциальный множитель.

Затем пучок пропускается через область, в которой имеется сильное поперечное электрическое поле. Создающее поле электроды изогнуты так, чтобы электрическое поле поперек пучка резко менялось. Тогда квадрат $\mathcal{E} \cdot \mathcal{E}$ электрического поля будет иметь большой градиент, перпендикулярный пучку. А у молекулы в состоянии $|I\rangle$ энергия с \mathcal{E}^2 растет, значит, эта часть пучка отклонится в область меньших \mathcal{E}^2 . Молекула же в состоянии $|II\rangle$, наоборот, отклонится к области, где \mathcal{E}^2 побольше, потому что ее энергия падает, когда \mathcal{E}^2 растет.

Кстати, при тех электрических полях, которые удается генерировать в лаборатории, энергия $\mu\mathcal{E}$ всегда много меньше A . В этом случае корень в уравнении (7.30) приближенно равен

$$A \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\mu^2 \mathcal{E}^2}{A^2} \right). \quad (7.32)$$

Во всех практических случаях энергетические уровни, стало быть, равны

$$E_I = E_0 + A + \frac{\mu^2 \mathcal{E}^2}{2A} \quad (7.33)$$

и

$$E_{II} = E_0 - A - \frac{\mu^2 \mathcal{E}^2}{2A}, \quad (7.34)$$

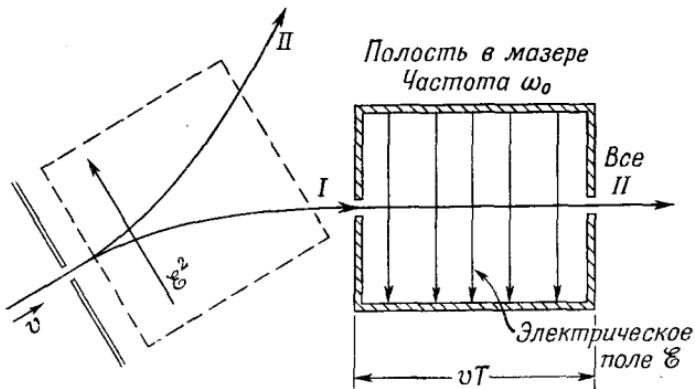
и энергии с \mathcal{E}^2 меняются линейно. Действующая на молекулы сила тогда равна

$$\mathbf{F} = \frac{\mu^2}{2A} \nabla \mathcal{E}^2. \quad (7.35)$$

Энергия в электрическом поле у многих молекул пропорциональна \mathcal{E}^2 . Коэффициент — это поляризуемость молекулы. Поляризуемость аммиака необычно высока: у него A в знаменателе очень мало. Стало быть, молекулы аммиака очень чувствительны к электрическому полю.

§ 3. Переходы в поле, зависящем от времени

В аммиачном мазере пучок молекул в состоянии $|I\rangle$ и с энергией E_I пропускается через резонансную полость, как показано на фиг. 7.4. Другой пучок отводится прочь. Внутри полости существует меняющееся во времени электрическое поле, так что нашей очередной задачей явится изучение поведения молекулы в электрическом поле, которое меняется во времени. Это совершенно новый род задач — задача с гамильтонианом, меняющимся во времени. Раз H_{ij} зависит от \mathcal{E} , то и H_{ij} меняется во времени, и нам надлежит определить поведение системы в этих обстоятельствах.



Фиг. 7.4. Схематическое изображение аммиачного мазера.

Для начала выпишем уравнения, которые нужно решить:

$$i\hbar \frac{dC_1}{dt} = (E_0 + \mu\mathcal{E}) C_1 - AC_2, \quad (7.36)$$

$$i\hbar \frac{dC_2}{dt} = -AC_1 + (E_0 - \mu\mathcal{E}) C_2.$$

Для определенности положим, что электрическое поле меняется синусоидально; тогда можно написать

$$\mathcal{E} = 2\mathcal{E}_0 \cos \omega t = \mathcal{E}_0 (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}). \quad (7.37)$$

На самом деле частота ω берется всегда очень близкой к резонансной частоте молекулярного перехода $\omega_0 = 2A/\hbar$, но пока мы для общности будем считать ω произвольной. Лучший способ решить наши уравнения — это, как и прежде, составить из C_1 и C_2 линейные комбинации. Сложим поэтому оба уравнения, разделим на $\sqrt{2}$ и вспомним определения C_I и C_{II} из (7.13). Получим

$$i\hbar \frac{dC_{II}}{dt} = (E_0 - A) C_{II} + \mu\mathcal{E} C_I. \quad (7.38)$$

Вы видите, что это похоже на (7.9), но появился добавочный член от электрического поля. Равным образом, вычитая уравнения (7.36), получаем

$$i\hbar \frac{dC_I}{dt} = (E_0 + A) C_I + \mu\mathcal{E} C_{II}. \quad (7.39)$$

Вопрос теперь в том, как решить эти уравнения. Это труднее, чем прежде, потому что \mathcal{E} зависит от t ; и действительно, при общем $\mathcal{E}(t)$ решение не представимо в элементарных функциях. Однако, пока электрическое поле мало, можно добиться

хорошего приближения. Сперва напишем

$$\begin{aligned} C_I &= \gamma_I e^{-i(E_0 + A)t/\hbar} = \gamma_I e^{-i(E_I)t/\hbar}, \\ C_{II} &= \gamma_{II} e^{-i(E_0 - A)t/\hbar} = \gamma_{II} e^{-i(E_{II})t/\hbar}. \end{aligned} \quad (7.40)$$

Если бы электрического поля не было, то, беря в качестве γ_I и γ_{II} две комплексные постоянные, мы бы получили правильное решение. Ведь поскольку вероятность быть в состоянии $|I\rangle$ есть квадрат модуля C_I , а вероятность быть в состоянии $|II\rangle$ есть квадрат модуля C_{II} , то вероятность быть в состоянии $|I\rangle$ или в состоянии $|II\rangle$ равна просто $|\gamma_I|^2$ или $|\gamma_{II}|^2$. Например, если бы система начинала развиваться из состояния $|II\rangle$ так, что γ_I было бы нулем, а $|\gamma_{II}|^2$ — единицей, то эти условия сохранились бы навсегда. Молекула из состояния $|II\rangle$ никогда бы не перешла в состояние $|I\rangle$.

Польза записи решений в форме (7.40) состоит в том, что оно сохраняет свой вид и тогда, когда есть электрическое поле, если только $\mu\mathcal{E}$ меньше A , только γ_I и γ_{II} при этом станут медленно меняющимися функциями времени. «Медленно меняющиеся» означает медленно в сравнении с экспоненциальными функциями. В этом весь фокус. Для получения приближенного решения используется тот факт, что γ_I и γ_{II} меняются медленно.

Подставим теперь C_I из (7.40) в дифференциальное уравнение (7.39), но вспомним, что γ_I тоже зависит от t . Имеем

$$i\hbar \frac{dC_I}{dt} = E_I \gamma_I e^{-iE_I t/\hbar} + i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt} e^{-iE_I t/\hbar}.$$

Дифференциальное уравнение обращается в

$$(E_I \gamma_I + i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt}) e^{-(i/\hbar) E_I t} = E_I \gamma_I e^{-(i/\hbar) E_I t} + \mu\mathcal{E} \gamma_{II} e^{-(i/\hbar) E_{II} t}. \quad (7.41)$$

Равным образом уравнение для dC_{II}/dt обращается в

$$(E_{II} \gamma_{II} + i\hbar \frac{d\gamma_{II}}{dt}) e^{-(i/\hbar) E_{II} t} = E_{II} \gamma_{II} e^{-(i/\hbar) E_{II} t} + \mu\mathcal{E} \gamma_I e^{-(i/\hbar) E_I t}. \quad (7.42)$$

Обратите теперь внимание, что в обеих частях каждого уравнения имеются одинаковые члены. Сократим их и умножим первое уравнение на $e^{+iE_I t/\hbar}$, а второе на $e^{+iE_{II} t/\hbar}$. Вспоминая, что $(E_I - E_{II}) = 2A = \hbar\omega_0$, мы в конце концов получаем

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt} &= \mu\mathcal{E}(t) e^{i\omega_0 t} \gamma_{II}, \\ i\hbar \frac{d\gamma_{II}}{dt} &= \mu\mathcal{E}(t) e^{-i\omega_0 t} \gamma_I. \end{aligned} \quad (7.43)$$

Получилась довольно простая пара уравнений — и пока еще точная. Производная от одной переменной есть функция от времени $\mu \mathcal{E}(t) e^{i\omega_0 t}$, умноженная на вторую переменную; производная от второй — такая же функция от времени, умноженная на первую. Хотя эти простые уравнения в общем не решаются, но в некоторых частных случаях мы решим их.

Нас, по крайней мере сейчас, интересует только случай колеблющегося электрического поля. Взяв $\mathcal{E}(t)$ в форме (7.37), мы увидим, что уравнения для γ_I и γ_{II} обратятся в

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt} &= \mu \mathcal{E}_0 [e^{i(\omega+\omega_0)t} + e^{-i(\omega-\omega_0)t}] \gamma_{II}, \\ i\hbar \frac{d\gamma_{II}}{dt} &= \mu \mathcal{E}_0 [e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{-i(\omega+\omega_0)t}] \gamma_I. \end{aligned} \quad (7.44)$$

И вот если \mathcal{E}_0 достаточно мало, то скорости изменения γ_I и γ_{II} тоже будут малы. Обе γ не будут сильно меняться с t , особенно в сравнении с быстрыми вариациями, вызываемыми экспоненциальными членами. У этих экспоненциальных членов есть вещественные и мнимые части, которые колеблются с частотой $\omega + \omega_0$ или $\omega - \omega_0$. Члены с частотой $\omega + \omega_0$ колеблются вокруг среднего значения (нуля) очень быстро и поэтому не дадут сильного вклада в скорость изменения γ . Значит, можно сделать весьма разумное приближение, заменив эти члены их средним значением, т. е. нулем. Их просто убирают и в качестве приближения берут

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\gamma_I}{dt} &= \mu \mathcal{E}_0 e^{-i(\omega-\omega_0)t} \gamma_{II}, \\ i\hbar \frac{d\gamma_{II}}{dt} &= \mu \mathcal{E}_0 e^{i(\omega-\omega_0)t} \gamma_I. \end{aligned} \quad (7.45)$$

Но даже и оставшиеся члены с показателями, пропорциональными $(\omega - \omega_0)$, меняются быстро, если только ω не близко к ω_0 . Только тогда правая сторона будет меняться достаточно медленно для того, чтобы набежало большое число, пока интегрируешь эти уравнения по t . Иными словами, при слабом электрическом поле изо всех частот представляют важность лишь те, которые близки к ω_0 .

При тех приближениях, которые были сделаны для того, чтобы получить (7.45), эти уравнения можно решить и точно; но работа эта все же трудоемкая, и мы отложим ее на другое время, когда обратимся к другой задаче того же типа. Пока же мы их просто решим приближенно, или, лучше сказать, найдем точное решение для случая идеального резонанса $\omega = \omega_0$ и приближенное — для частот близ резонанса.

§ 4. Переходы при резонансе

Первым рассмотрим случай идеального резонанса. Если положить $\omega = \omega_0$, то экспоненты в обоих уравнениях (7.45) станут равными единице, и мы просто получим

$$\frac{d\gamma_I}{dt} = -\frac{i\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\gamma_{II}, \quad \frac{d\gamma_{II}}{dt} = -\frac{i\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\gamma_I. \quad (7.46)$$

Если из этих уравнений исключить сперва γ_I , а потом γ_{II} , то мы увидим, что каждое из них удовлетворяет дифференциальному уравнению простого гармонического движения

$$\frac{d^2\gamma}{dt^2} = -\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}\right)^2\gamma. \quad (7.47)$$

Общее решение этих уравнений может быть составлено из синусов и косинусов. Легко проверить, что решениями являются следующие выражения:

$$\begin{aligned} \gamma_I &= a \cos\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right) + b \sin\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right), \\ \gamma_{II} &= ib \cos\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right) - ia \sin\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right), \end{aligned} \quad (7.48)$$

где a и b — константы, которые надо еще определить так, чтобы они укладывались в ту или иную физическую ситуацию.

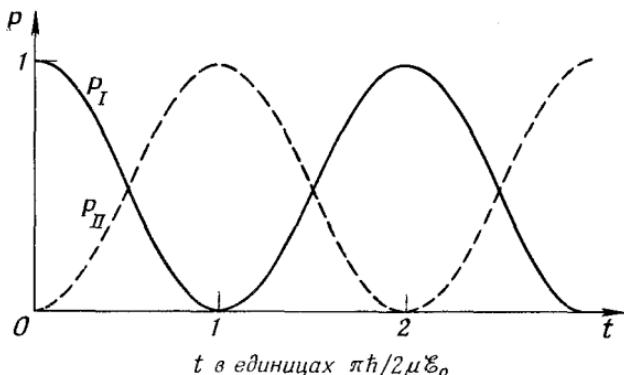
К примеру, предположим, что при $t=0$ наша молекулярная система была в верхнем энергетическом состоянии $|I\rangle$, а это требует [из уравнения (7.40)], чтобы $\gamma_I=1$ и $\gamma_{II}=0$ при $t=0$. Для такого случая должно быть $a=1$ и $b=0$. Вероятность того, что молекула окажется в том же состоянии $|I\rangle$ в какой-то позднейший момент t , равна квадрату модуля γ_I , или

$$P_I = |\gamma_I|^2 = \cos^2\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right). \quad (7.49)$$

Точно так же и вероятность того, что молекула окажется в состоянии $|II\rangle$, дается квадратом модуля γ_{II} :

$$P_{II} = |\gamma_{II}|^2 = \sin^2\left(\frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar}t\right). \quad (7.50)$$

Пока \mathcal{E} мало и пока мы находимся в резонансе, вероятности даются простыми колебательными функциями. Вероятность быть в состоянии $|I\rangle$ падает от единицы до нуля и возрастает опять, а вероятность быть в состоянии $|II\rangle$ растет от нуля до единицы и наоборот. Изменение обеих вероятностей во времени показано на фиг. 7.5. Нечего и говорить, что сумма обеих вероятностей всегда равна единице; ведь молекула всегда находится в *каком-то* состоянии.



Ф и г. 7.5. Вероятности обоих состояний молекулы аммиака в синусоидальном электрическом поле.

Положим, что прохождение через полость занимает у молекулы время T . Если сделать полость как раз такой длины, чтобы было $\mu\phi_0 T/\hbar = \pi/2$, то молекула, ныряющая в нее в состоянии $|I\rangle$, наверняка вынырнет из нее в состоянии $|II\rangle$. Если она вошла в полость в верхнем состоянии, то выйдет из полости в нижнем. Иными словами, ее энергия упадет, и эта потеря энергии не сможет перейти ни во что другое, а только в механизм, который генерирует поле. Детали, которые помогли бы вам разглядеть, как именно энергией молекулы питаются колебания полости, не так уж просты; однако нам и не нужно все эти детали изучать, потому что имеется принцип сохранения энергии. (Мы могли бы, если бы это было нужно, изучить их, но тогда нам пришлось бы иметь дело с квантовой механикой поля в полости наряду с квантовой механикой атома.)

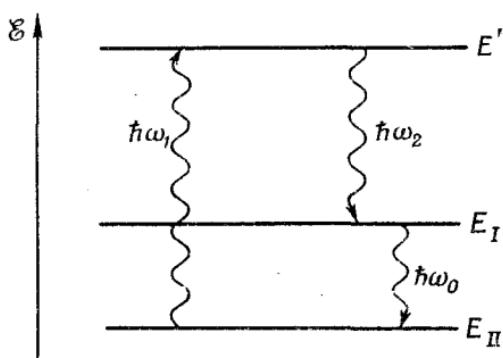
Подытожим. Молекула входит в полость, поле полости, колеблющееся с как раз нужной частотой, индуцирует переходы с верхнего состояния на нижнее, и высвобождаемой энергией питается осциллирующее поле. В работающий мазер молекулы доставляют достаточно энергии для того, чтобы поддерживались колебания полости, ее хватает не только на то, чтобы компенсировать потери в полости, но и на то, чтобы небольшие избытки энергии извлекались из полости. Итак, молекулярная энергия превращается в энергию внешнего электромагнитного поля.

Вспомним, что перед входом в полость нам приходилось пользоваться фильтром, который разделял пучок так, что в полость входило только верхнее состояние. Легко показать, что, если бы мы начали с молекул в нижнем состоянии, процесс пошел бы в другую сторону и энергия от полости отбиралась бы. Если пустить в полость нефильтрованный пучок, то сколь-

ко молекул будет отбирать энергию от полости, столько же из них будет отдавать ей свою энергию, и в итоге ничего не случится. В настоящем мазере, конечно, не обязательно делать $(\mu \mathcal{E}_0 T / \hbar)$ точно равным $\pi/2$. И при других значениях (кроме точных кратных π) существует какая-то вероятность переходов из состояния $|I\rangle$ в состояние $|II\rangle$. Но при этих других значениях прибор уже не имеет к. п. д., равного 100%; многие из молекул, покидающие полость, могли бы снабдить ее энергией, но не сделали этого.

На самом деле и скорости молекул неодинаковы; они распределены по Максвеллу. Это означает, что идеальные периоды времени для разных молекул окажутся различными, и невозможно получить к. п. д., равный 100%, сразу для всех молекул. Вдобавок имеется еще одно усложнение, которое, правда, легко принять во внимание, но на этой стадии мы не будем им заниматься. Вы помните, что электрическое поле обычно меняется в полости от места к месту. Когда молекулы дрейфуют вдоль полости, электрическое поле близ молекул меняется как-то очень сложно, сложнее, чем предположенное нами обычное синусоидальное колебание. Ясно, что для точного решения задачи следовало бы воспользоваться более сложными интегрированиями, но общая идея остается прежней.

Можно мазеры устраивать и иначе. Не отделять прибором Штерна — Герлаха атомы в состоянии $|I\rangle$ от атомов в состоянии $|II\rangle$, а собрать атомы в какой-то полости (в газообразном или твердом виде) и как-то переселить их из состояния $|II\rangle$ в состояние $|I\rangle$. Один такой способ применяется в так называемом трехуровневом мазере. Для него используются атомные системы с тремя уровнями энергии (фиг. 7.6) и со следующими специальными свойствами. Система поглощает излучение (скажем, свет) с энергией $\hbar\omega_1$ и переходит от низшего уровня энергии E_{II} к какому-то более высокому уровню E' , а затем быстро испускает фотоны с энергией $\hbar\omega_2$ и переходит в состояние $|I\rangle$ с энергией E_I . У состояния $|I\rangle$ большое время жизни, так что



Фиг. 7.6. Уровни энергии «трехуровневого» мазера.

его населенность может возрасти; создаются условия, благоприятствующие работе мазера между состояниями $|I\rangle$ и $|II\rangle$. Хотя такой прибор называют «трехуровневым» мазером, но сама мазерная процедура на самом деле происходит так же, как и у описанной нами двухуровневой системы.

Лазер — это всего-навсего мазер, действующий на световых частотах. «Полость» лазера обычно состоит попросту из двух зеркал, между которыми генерируются стоячие волны.

§ 5. Переходы вне резонанса

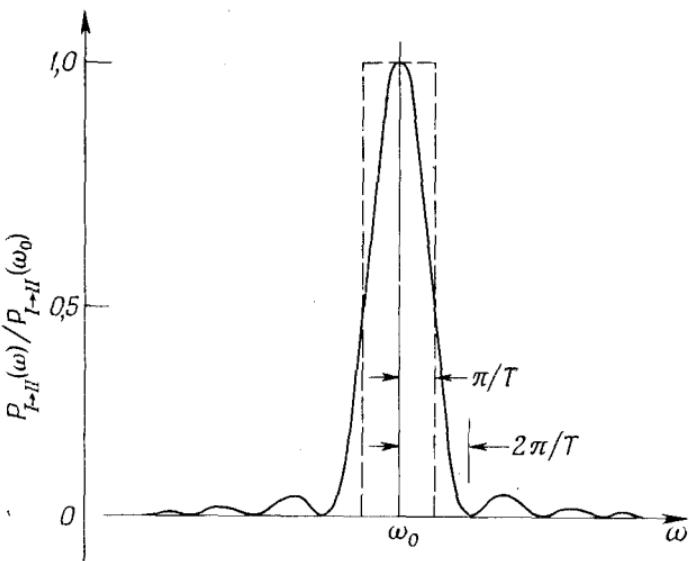
Наконец, хотелось бы выяснить, как изменяются состояния в условиях, когда частота полости, хотя и близка к ω_0 , но не совпадает с ней. Эту задачу можно было бы решить точно, но мы не будем пытаться это делать, а обратимся к важному случаю малого электрического поля и малого промежутка времени T , так что $\mu\mathcal{E}_0 T/\hbar$ много меньше единицы. Тогда даже в случае уже изученного нами идеального резонанса вероятность перехода очень мала. Будем исходить опять из того, что $\gamma_I=1$ и $\gamma_{II}=0$. Тогда мы вправе ожидать, что в течение всего времени T наша величина γ_I останется близкой к единице, а γ_{II} будет малой по сравнению с единицей, и задача облегчается. Из второго уравнения (7.45) мы можем подсчитать γ_{II} , принимая γ_I равной единице и интегрируя от $t=0$ до $t=T$. Получается

$$\gamma_{II} = \frac{\mu\mathcal{E}_0}{\hbar} \left[\frac{1 - e^{i(\omega - \omega_0)T}}{\omega - \omega_0} \right]. \quad (7.51)$$

Это та величина γ_{II} , которая стоит в (7.40), и она дает амплитуду того, что переход из состояния $|I\rangle$ в состояние $|II\rangle$ произойдет за время T . Вероятность $P(I \rightarrow II)$ такого перехода равна $|\gamma_{II}|^2$, или

$$P(I \rightarrow II) = |\gamma_{II}|^2 = \left[\frac{\mu\mathcal{E}_0 T}{\hbar} \right]^2 \frac{\sin^2 [(\omega - \omega_0) T / 2]}{[(\omega - \omega_0) T / 2]^2}. \quad (7.52)$$

Интересно начертить эту вероятность при фиксированном времени T как функцию частоты полости, чтобы посмотреть, насколько чувствительна она к частотам близ резонансной частоты ω_0 . Кривая $P(I \rightarrow II)$ показана на фиг. 7.7. (Вертикальная шкала была подогнана так, чтобы в пике была единица, для этого разделили на величину вероятности при $\omega=\omega_0$.) С подобными кривыми мы встречались в теории дифракции, так что они должны быть вам знакомы. Кривая довольно резко падает до нуля при $(\omega - \omega_0) = 2\pi/T$ и никогда при больших



Фиг. 7.7. Вероятность перехода для молекулы аммиака как функция частоты.

отклонениях частоты снова не достигает заметной величины. Почти вся площадь под кривой лежит в пределах $\pm \pi/T$. Можно показать [с помощью формулы $\int_{-\infty}^{\infty} (\sin^2 x/x^2) dx = \pi$], что площадь под кривой равна $2\pi/T$ и совпадает с площадью выделенного штрихованной линией прямоугольника.

Посмотрим, что это дает для реального мазера. Возьмем разумное время пребывания молекулы аммиака в полости, скажем 1 мсек. Тогда для $f_0 = 24\ 000\ Mгц$ можно подсчитать, что вероятность падает до нуля при отклонениях $(f-f_0)/f_0 = 1/f_0 T$, т. е. порядка $5 \cdot 10^{-8}$. Очевидно, что для заметных вероятностей перехода частоты должны очень точно совпадать с ω_0 . Этот эффект является основой той большой точности, которой можно достичь в «атомных» часах, работающих на принципе мазера.

§ 6. Поглощение света

Наше изложение применимо и к более общему случаю, чем аммиачный мазер. Мы ведь изучали поведение молекулы под влиянием электрического поля независимо от того, заключено оно в полость или нет. Просто можно было направить пучок «света» — микроволновой частоты — на молекулу и искать вероятность испускания или поглощения. Наши уравнения ничуть не хуже применимы и к этому случаю, но только

лучше переписать их на языке интенсивности излучения, а не электрического поля. Если определить интенсивность \mathcal{F} как средний поток энергии через единицу площади в секунду, то из гл. 27 (вып. 6) следует

$$\mathcal{F} = \epsilon_0 c^2 |\mathbf{E} \times \mathbf{B}|_{\text{сред}} = \frac{1}{2} \epsilon_0 c^2 (\mathbf{E} \times \mathbf{B})_{\text{макс}} = 2\epsilon_0 c \mathcal{E}_0^2.$$

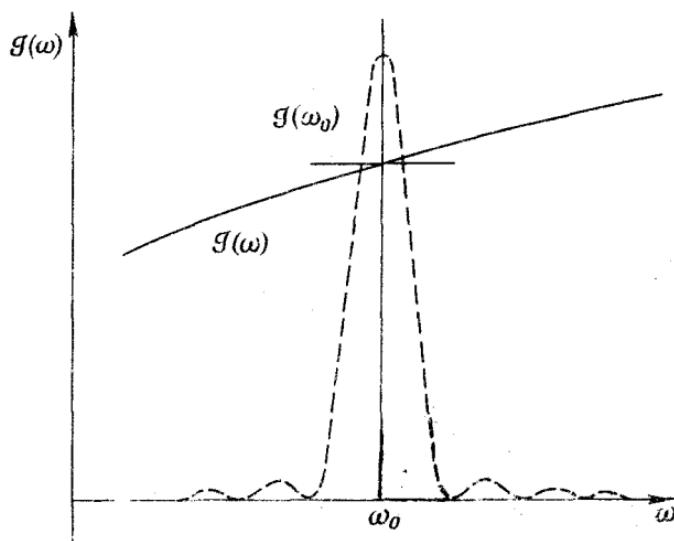
(Максимум \mathcal{E} равен $2\mathcal{E}_0$.) Вероятность перехода принимает вид

$$P(I \rightarrow II) = 2\pi \left[\frac{\mu^2}{4\pi\epsilon_0 h^2 c} \right] \mathcal{F} T^2 \frac{\sin^2 [(\omega - \omega_0) T/2]}{[(\omega - \omega_0) T/2]^2}. \quad (7.53)$$

Обычно свет, освещдающий подобную систему, не точно монохроматичен. Поэтому интересно решить еще одну задачу — подсчитать вероятность перехода, когда интенсивность света на единицу интервала частот равна $\mathcal{I}(\omega)$ и покрывает собой широкую полосу, включающую ω_0 . Тогда вероятность перехода от $|I\rangle$ к $|II\rangle$ обратится в интеграл

$$P(I \rightarrow II) = 2\pi \left[\frac{\mu^2}{4\pi\epsilon_0 h^2 c} \right] T^2 \int_0^\infty \mathcal{I}(\omega) \frac{\sin^2 [(\omega - \omega_0) T/2]}{[(\omega - \omega_0) T/2]^2} d\omega. \quad (7.54)$$

Как правило, $\mathcal{I}(\omega)$ меняется с ω медленнее, чем острый резонансный фактор. Эти две функции могут выглядеть так, как показано на фиг. 7.8. В таких случаях можно заменить $\mathcal{I}(\omega)$



Фиг. 7.8. Спектральная интенсивность $\mathcal{I}(\omega)$ может быть представлена своим значением при ω_0 .

ее значением $\mathcal{T}(\omega_0)$ в центре острой резонансной кривой и вынести из-под интеграла. Оставшийся интеграл — это просто площадь под кривой на фиг. 7.7, которая, как известно, равна $2\pi/T$. Мы приходим к результату

$$P(I \rightarrow II) = 4\pi^2 \left[\frac{\mu^2}{4\pi e_0 \hbar^2 c} \right] \mathcal{T}(\omega_0) T. \quad (7.55)$$

Это очень важный результат: *перед нами общая теория поглощения света любой молекулярной или атомной системой*. Хотя мы вначале считали, что состояние $|I\rangle$ обладает более высокой энергией, чем состояние $|II\rangle$, но никакие наши рассуждения от этого не зависели. Уравнение (7.55) соблюдается и тогда, когда энергия состояния $|I\rangle$ ниже энергии состояния $|II\rangle$; тогда $P(I \rightarrow II)$ представляет собой вероятность перехода с *поглощением* энергии от падающей электромагнитной волны. Поглощение атомной системой света всегда предполагает, что имеется амплитуда для перехода в колеблющемся электрическом поле между состояниями, отличающимися на энергию $E = \hbar\omega_0$. В каждом отдельном случае она рассчитывается так же, как мы это проделали, и дает выражения наподобие (7.55). Поэтому мы подчеркнем следующие свойства этой формулы. Во-первых, вероятность пропорциональна T . Иными словами, существует неизменная вероятность на единицу времени, что переход произойдет. Во-вторых, эта вероятность пропорциональна *интенсивности* света, падающего на систему. В-третьих, вероятность перехода пропорциональна μ^2 , где, как вы помните, $\mu \mathcal{E}$ определяет энергетический сдвиг, вызываемый электрическим полем \mathcal{E} . По этой именно причине $\mu \mathcal{E}$ появлялось и в уравнениях (7.38) и (7.39) в качестве коэффициента связи, ответственного за переход между стационарными состояниями $|I\rangle$ и $|II\rangle$. Иными словами, для рассматривавшихся нами малых \mathcal{E} член $\mu \mathcal{E}$ есть так называемое «возмущение» в матричном элементе гамильтонiana, связывающем состояния $|I\rangle$ и $|II\rangle$. В общем случае $\mu \mathcal{E}$ заменилось бы матричным элементом $\langle II|H|I \rangle$ (см. гл. 3, § 6).

В гл. 42, § 5 (вып. 4) мы говорили о связи между поглощением света, вынужденным испусканием и самопроизвольным испусканием в терминах введенных Эйнштейном коэффициентов A и B . Здесь наконец-то в наших руках появляется квантовомеханическая процедура для подсчета этих коэффициентов. То, что мы обозначили $P(I \rightarrow II)$ для нашей аммиачной двухуровневой молекулы, в точности соответствует коэффициенту поглощения B_{nm} в эйнштейновской теории излучения. Из-за сложности молекулы аммиака — слишком трудной для расчета — нам пришлось взять матричный элемент $\langle II|H|I \rangle$ в виде $\mu \mathcal{E}$ и говорить, что μ извлекается из опыта. Для более простых атомных систем величину μ_{mn} , отвечающую к произ-

вольному переходу, можно подсчитать, исходя из определения

$$\mu_{mn} \mathcal{G} = \langle m | H | n \rangle = H_{mn}, \quad (7.56)$$

где H_{mn} — это матричный элемент гамильтониана, учитывающего влияние слабого электрического поля. Величина μ_{mn} , вычисленная таким способом, называется **электрическим дипольным матричным элементом**. Квантовомеханическая теория поглощения и испускания света сводится тем самым к расчету этих матричных элементов для тех или иных атомных систем.

Итак, изучение простых систем с двумя состояниями (двухуровневых) привело нас к пониманию общей проблемы поглощения и испускания света.

ДРУГИЕ СИСТЕМЫ С ДВУМЯ СОСТОЯНИЯМИ

§ 1. Молекулярный ион водорода

§ 1. Молекулярный ион водорода

В предыдущей главе мы обсудили некоторые свойства молекулы аммиака в предположении, что это система о двух состояниях (или двухуровневая система). На самом деле, конечно, это не так — у нее есть множество состояний: вращения, колебания, перемещения и т. д., но в каждом из этих состояний движения следует говорить о паре внутренних состояний из-за того, что атом азота может быть переброшен с одной стороны плоскости трех атомов водорода на другую. Сейчас мы рассмотрим другие примеры систем, которые в том или ином приближении можно будет считать системами с двумя состояниями. Многое здесь будет приближенным, потому что всегда имеется множество других состояний, и в более точном анализе их следовало бы учитывать. Но в каждом из этих примеров мы окажемся в силах очень многое понять, рассуждая только о двух состояниях.

Раз мы будем иметь дело только с двухуровневыми системами, то нужный нам гамильтониан будет выглядеть так же, как и в предыдущей главе. Когда гамильтониан не зависит от времени, то известно, что имеются два стационарных состояния с определенными (и обычно разными) энергиями. В общем случае, однако, мы будем начинать наш анализ с выбора базисных состояний (*не обязательно* этих стационарных состояний), таких, которые, скажем, имеют другой простой физический смысл. Тогда стационарные состояния системы будут представлены линейной комбинацией этих базисных состояний.

Для удобства подытожим важнейшие уравнения, выведенные в гл. 7. Пусть первоначально в качестве базисных состояний были приняты $|1\rangle$ и $|2\rangle$. Тогда любое состояние $|\psi\rangle$ представляется их линейной комбинацией:

$$|\psi\rangle = |1\rangle\langle 1| \psi\rangle + |2\rangle\langle 2| \psi\rangle = |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2. \quad (8.1)$$

Амплитуды C_i (под этим подразумеваются как C_1 , так и C_2) удовлетворяют двум линейным дифференциальным уравнениям

$$i\hbar \frac{dC_i}{dt} = \sum_j \dot{H}_{ij} C_j, \quad (8.2)$$

где и i , и j принимают значения 1 и 2.

Когда члены гамильтониана H_{ij} не зависят от t , то два состояния с определенной энергией (стационарные), которые мы обозначим

$$|I\rangle = |I\rangle e^{-(i/\hbar)E_I t} \text{ и } |\psi_{II}\rangle = |II\rangle e^{-(i/\hbar)E_{II} t},$$

обладают энергиейми

$$\begin{aligned} E_I &= \frac{H_{11} + H_{22}}{2} + \sqrt{\left(\frac{H_{11} - H_{22}}{2}\right)^2 + H_{12}H_{21}}, \\ E_{II} &= \frac{H_{11} + H_{22}}{2} - \sqrt{\left(\frac{H_{11} - H_{22}}{2}\right)^2 + H_{12}H_{21}}. \end{aligned} \quad (8.3)$$

Для каждого из этих состояний оба C имеют одинаковую зависимость от времени. Векторы состояний $|I\rangle$ и $|II\rangle$, которые отвечают стационарным состояниям, связаны с нашими первоначальными базисными состояниями $|1\rangle$ и $|2\rangle$ формулами

$$\begin{aligned} |I\rangle &= |1\rangle a_1 + |2\rangle a_2, \\ |II\rangle &= |1\rangle a'_1 + |2\rangle a'_2. \end{aligned} \quad (8.4)$$

Здесь a — комплексные постоянные, удовлетворяющие равенствам

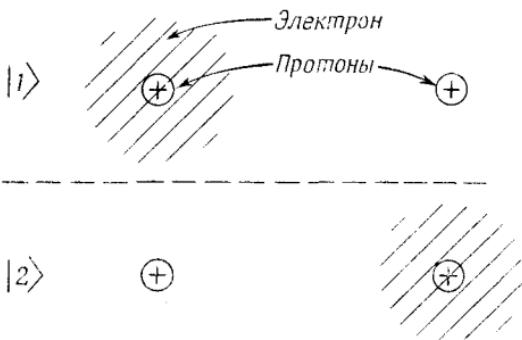
$$\begin{aligned} |a_1|^2 + |a_2|^2 &= 1, \\ \frac{a_1}{a_2} &= \frac{H_{12}}{E_I - H_{11}}; \end{aligned} \quad (8.5)$$

$$\begin{aligned} |a'_1|^2 + |a'_2|^2 &= 1, \\ \frac{a'_1}{a'_2} &= \frac{H_{12}}{E_{II} - H_{22}}. \end{aligned} \quad (8.6)$$

Если H_{11} и H_{22} между собой равны, скажем оба равны E_0 , а $H_{12} = H_{21} = -A$, то $E_I = E_0 + A$, $E_{II} = E_0 - A$, и состояния $|I\rangle$ и $|II\rangle$ особенно просты:

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\rangle - |2\rangle], \quad |II\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1\rangle + |2\rangle]. \quad (8.7)$$

Фиг. 8.1. Совокупность базисных состояний для двух протонов и электрона.



Эти результаты мы хотим теперь использовать, чтобы рассмотреть ряд интересных примеров, взятых из химии и физики. Первый пример — это ион молекулы водорода. Положительно ионизированная молекула водорода состоит из двух протонов и одного электрона, как-то бегающего вокруг них. Каких состояний можно ожидать для этой системы, если расстояние между протонами велико? Ответ вполне ясен: электрон расположится вплотную к одному протону и образует атом водорода в его наименшем состоянии, а другой протон останется одиночкой, положительным ионом. Значит, когда два протона удалены друг от друга, то можно себе наглядно представить одно физическое состояние, в котором электрон «придан» одному из протонов. Существует, естественно, и другое, симметричное первому состояние, в котором электрон находится возле второго протона, а ионом оказывается первый протон. Этую пару состояний мы и сделаем базисными, обозначив их $|1\rangle$ и $|2\rangle$. Они показаны на фиг. 8.1. Конечно, на самом деле у электрона возле протона имеется множество состояний, потому что их комбинация может существовать в виде одного из возбужденных состояний атома водорода. Но нас сейчас не интересует это разнообразие состояний, мы будем рассматривать лишь случай, когда атом водорода пребывает в наименшем состоянии — своем основном состоянии, — и пренебрежем на время спином электрона. Мы просто предположим*, что для всех наших состояний спин электрона направлен вверх по оси z .

Чтобы убрать электрон из атома водорода, требуется 13,6 эв энергии. Столько же энергии — очень много по нашим теперешним масштабам — понадобится и на то, чтобы электрон оказался на полпути между протонами (коль скоро сами протоны сильно удалены друг от друга). Так что по классическим понятиям электрону немыслимо перескочить от одного протона к

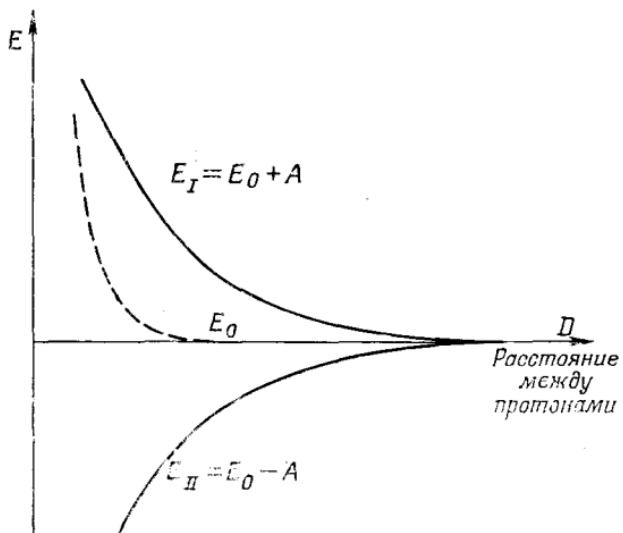
* До тех пор, пока нет сильных магнитных полей, это предположение вполне удовлетворительно. Влияние магнитных полей на электрон мы обсудим в этой же главе позже, а очень слабые спиновые эффекты в атоме водорода — в гл. 10.

другому. Однако в квантовой механике это возможно, хоть и не очень вероятно. Существует некая малая амплитуда того, что электрон уйдет от одного протона к другому. Тогда в первом приближении каждое из наших базисных состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ будет иметь энергию E_0 , равную просто сумме энергий атома водорода и протона. Матричные элементы H_{11} и H_{22} гамильтониана мы можем принять приближенно равными E_0 . Другие матричные элементы H_{12} и H_{21} , представляющие собой амплитуды перехода электрона туда и обратно, мы опять запишем в виде $-A$.

Вы видите, что это та же игра, в какую мы играли в последних двух главах. Если пренебречь способностью электрона перескакивать туда и обратно, то два состояния будут иметь в точности одинаковую энергию. Эта энергия, однако, расщепляется на два энергетических уровня из-за того, что электрон может переходить туда и назад, и чем больше вероятность перехода, тем больше расщепление. Стало быть, два уровня энергии системы равны E_0+A и E_0-A , и состояния, у которых такие энергии, даются уравнениями (8.7).

Из нашего решения мы видим, что если протон и водородный ион как-то расположить близко один к другому, то электрон не останется подле одного протона, а будет перескакивать от протона к протону и обратно. Если вначале он был близ одного из протонов, то затем он начнет колебаться туда и назад между состояниями $|1\rangle$ и $|2\rangle$, давая решение, меняющееся во времени. Чтобы получить решение, отвечающее самой низкой энергии (которое не меняется со временем), необходимо, чтобы вначале система обладала одинаковыми амплитудами пребывания электрона возле каждого из протонов. Кстати, вспомните, что электронов отнюдь не два; мы совсем не утверждаем, что вокруг каждого протона имеется электрон. Имеется только один электрон, и это он имеет одинаковую амплитуду ($1/\sqrt{2}$ по величине) быть в том или ином положении.

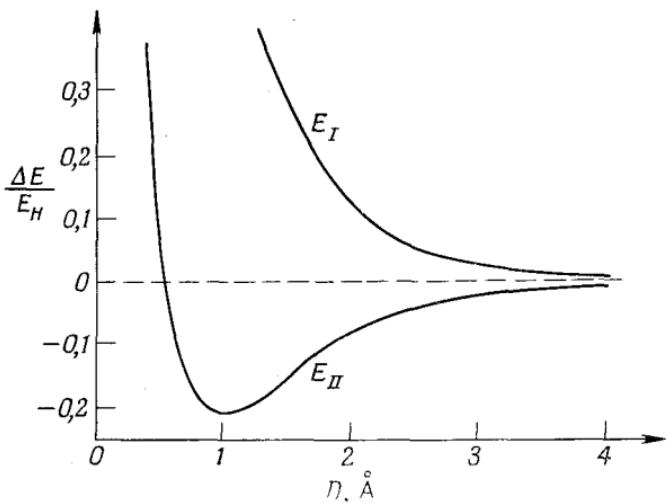
Дальше, для электрона, который находится близ одного протона, амплитуда A оказаться близ другого зависит от расстояния между протонами. Чем они ближе один к другому, тем больше амплитуда. Вы помните, что в гл. 5 мы говорили об амплитуде «проникновения» электрона «сквозь барьер», на что по классическим канонам он не способен. Здесь то же самое положение дел. Амплитуда того, что электрон переберется к другому протону, спадает с расстоянием примерно по экспоненте (для больших расстояний). Раз вероятность, а следовательно, и значение A при сближении протонов возрастают, то возрастает и расстояние между уровнями энергии. Если система находится в состоянии $|1\rangle$, то энергия E_0+A с уменьшением расстояния растет так, что эти квантовомеханические эффекты приводят к силе отталкивания, стремящейся раз-



Фиг. 8.2. Энергии двух стационарных состояний иона H_2^+ как функция расстояния между двумя протонами.

вести протоны. Если же система пребывает в состоянии $|II\rangle$, то полная энергия при сближении протонов *убывает*; существует *сила притяжения*, подтягивающая протоны один к другому. Эти энергии меняются с расстоянием между протонами примерно так, как показано на фиг. 8.2. Тем самым у нас появляется квантовомеханическое объяснение силы связи, скрепляющей ион H_2^+ .

Однако мы позабыли об одной вещи. В дополнение к только что описанной силе имеется также электростатическая сила взаимного отталкивания двух протопов. Когда оба протона очень удалены друг от друга (как на фиг. 8.1), то «голый» протон видит перед собой только нейтральный атом, так что электростатической силой можно пренебречь. При очень тесных сближениях, однако, «голый» протон оказывается порой «внутри» электронного распределения, т. е. в среднем он ближе к протону, чем к электрону. Появляется некоторая добавочная электростатическая энергия, которая, конечно, положительна. Эта энергия — она тоже зависит от расстояния — должна быть включена в E_0 . Значит, за E_0 мы должны принять нечто похожее на штриховую кривую на фиг. 8.2; она быстро подымается на расстояниях, меньших, чем радиус атома водорода. Энергию переворота A надо вычесть и прибавить к этому E_0 . Если это сделать, то энергии E_I и E_{II} будут меняться с межпротонным расстоянием D , как показано на фиг. 8.3. [На рисунке мы воспроизвели результаты более детальных выкладок.



Ф и г. 8.3. Уровни энергии иона H_2^+ как функция межпротонного расстояния D ($E_{\text{H}} = 13,6$ эв).

Межпротонное расстояние дано в ангстремах ($1 \text{ \AA} = 10^{-8}$ см), а избыток энергии над протоном плюс водородным ионом дается в единицах энергии связи атома водорода, так называемых «ридбергах» ($13,6$ эв).] Мы видим, что состояние $|II\rangle$ имеет точку минимума энергии — равновесную конфигурацию (условие наименьшей энергии) для иона H_2^+ . Энергия в этой точке ниже, чем энергии отдельно протона и отдельно водородного иона, так что система связана. Отдельный электрон действует так, что скрепляет протоны. Химик назвал бы это «одноэлектронной связью».

Этот род химической связи часто также называют «квантовомеханическим резонансом» (по сходству с двумя связанными маятниками, о котором мы уже говорили). Но звучит это таинственнее, чем оно есть на самом деле; это только тогда «резонанс», когда базисные состояния с самого начала неудачно выбраны, как у нас и было! А если выбрать состояние $|II\rangle$, вы сразу получите наименьшее энергетическое состояние — и все.

Можно и по-иному объяснить, отчего энергия этого состояния должна быть ниже, чем у протона плюс атома водорода. Представим себе электрон возле двух протонов, удаленных на определенное, но не очень большое расстояние. Вы помните, что электрон возле одиночного протона «размазан» из-за принципа неопределенности. Он ищет равновесия, пытаясь раздобыть энергию пониже (низкую кулоновскую потенциальную энергию) и не оказаться при этом сжатым в пространстве чрезчур тесно, что привело бы к высокой кинетической энергии

(из-за соотношения неопределенности $\Delta p \Delta x \approx \hbar$). Если же протонов два, то будет больше места, где у электрона может быть низкая потенциальная энергия. Он может размазаться (снижая тем самым свою кинетическую энергию), не повышая при этом своей потенциальной энергии. В итоге его энергия ниже, чем в атоме водорода. Тогда почему же у другого состояния $|I\rangle$ энергия выше? Но заметьте, что это состояние есть разность состояний $|I\rangle$ и $|2\rangle$. Вследствие симметрии $|I\rangle$ и $|2\rangle$ разность должна иметь нулевую амплитуду того, что электрон окажется на полпути между протонами. Это означает, что электрон немного сильнее ограничен в пространстве, что и приводит к большей энергии.

Следует сказать, что наше приближенное рассмотрение иона H_2^+ как двухуровневой системы рассыпается в прах, едва лишь протоны сблизятся до минимума энергии на кривой фиг. 8.3; тогда больше не получается хорошего значения истинной энергии связи. На малых удалениях энергии двух «состояний» на самом деле уже не равны E_0 ; требуется более тонкое квантовомеханическое рассмотрение.

Положим, мы теперь заинтересуемся, что случилось бы, если бы вместо двух протонов у нас были два разных объекта, скажем один протон и один положительный ион лития (причем обе частицы по-прежнему имеют по единичному положительному заряду). В этом случае два члена H_{11} и H_{22} в гамильтониане больше не совпадали бы; они были бы совершенно различны. Если бы оказалось, что разность $(H_{11} - H_{22})$ по абсолютной величине много больше $A = -H_{12}$, то сила притяжения стала бы очень слабой. В этом можно убедиться следующим образом.

Если в (8.3) подставить $H_{12}H_{21} = A^2$, то мы получим

$$E = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \frac{H_{11} - H_{22}}{2} \sqrt{1 + \frac{4A^2}{(H_{11} - H_{22})^2}}.$$

Когда $H_{11} - H_{22}$ много больше A^2 , корень довольно точно равен

$$1 + \frac{2A^2}{(H_{11} - H_{22})^2}.$$

Тогда энергии обращаются в

$$\begin{aligned} E_I &= H_{11} + \frac{A^2}{H_{11} - H_{22}}, \\ E_{II} &= H_{22} - \frac{A^2}{H_{11} - H_{22}}. \end{aligned} \tag{8.8}$$

Теперь они почти вплотную совпадают с энергиями H_{11} и H_{22} изолированных атомов и только чуть-чуть отличаются из-за наличия амплитуды перескока A .

Разность энергий ($E_I - E_{II}$) равна

$$(H_{11} - H_{22}) + \frac{2A^2}{H_{11} - H_{22}}.$$

Добавка к расстоянию между уровнями из-за переброса электрона уже не равна $2A$; она составляет $A/(H_{11} - H_{22})$ — часть этой величины (что по предположению много меньше единицы). Кроме того, сама зависимость $E_I - E_{II}$ от расстояния между ядрами сейчас намного слабее, чем для иона H_2^+ : в нее тоже входит множитель $A/(H_{11} - H_{22})$. Можно поэтому понять, отчего связь несимметричных двуатомных молекул, как правило, очень слаба.

В нашей теории иона H_2^+ мы открыли объяснение механизма, с помощью которого электрон, распределенный между двумя протонами, создает в итоге силу притяжения между ними даже тогда, когда они очень удалены друг от друга. Сила притяжения проистекает от уменьшения энергии системы, вызываемого тем, что у электрона есть возможность прыгать от одного протона к другому. При таких прыжках система переходит от конфигурации атом водорода — протон к конфигурации протон — атом водорода и обратно. Процесс символически можно записать так:

$$(H, p) \rightleftharpoons (p, H).$$

Сдвиг энергии, вызываемый этим процессом, пропорционален амплитуде A того, что электрон с энергией $-W_H$ (его энергия связи в атоме водорода) может от одного протона перейти к другому.

При больших расстояниях R между протонами электростатическая потенциальная энергия электрона близка к нулю почти во всем том пространстве, которое он вынужден преодолеть, делая прыжок. Так что в этом пространстве электрон движется почти как свободная частица в пустом пространстве, но обладая при этом *отрицательной* энергией! В гл. 1 [уравнение (1.7)] мы видели, что амплитуда для частицы определенной энергии перейти с одного места на другое, удаленное на расстояние r , пропорциональна

$$\frac{e^{(i/\hbar) pr}}{r},$$

где p — импульс, отвечающий заданной энергии. В теперешнем случае (применяется нерелятивистская формула) p определяется из выражения

$$\frac{p^2}{2m} = -W_H. \quad (8.9)$$

А это значит, что p — число мнимое:

$$p = i \sqrt{2mW_H}$$

(другой знак перед корнем приводит к абсурду).

Стало быть, следует ожидать, что амплитуда A для иона H_2^+ будет меняться как

$$A \sim \frac{e^{-\left(\sqrt{2mW_H}\right)R}}{R} \quad (8.10)$$

при больших расстояниях R между протонами. Сдвиг энергии, вызываемый электронной связью, пропорционален A ; значит, существует сила, сближающая два протона, которая пропорциональна (при больших R) производной от (8.10) по R .

Наконец, для полноты следует заметить, что в одноэлектронной системе с двумя протонами есть еще один эффект, который тоже приводит к зависимости энергии от R . Мы пока им пренебрегали, поскольку он обычно не очень важен, за исключением как раз тех больших расстояний, на которых энергия обменного члена A убывает экспоненциально до очень малых величин. Новый эффект, о котором мы говорим, — это электростатическое притяжение протона к атому водорода, возникающее по той же причине, по какой любой заряженный предмет притягивает к себе незаряженный. «Голый» протон создает электрическое поле \mathcal{E} (изменяющееся как $1/R^2$) возле нейтрального атома водорода. Атом становится поляризованным, приобретая наведенный дипольный момент μ , пропорциональный \mathcal{E} . Энергия диполя есть $\mu\mathcal{E}$, т. е. пропорциональна \mathcal{E}^2 , или $1/R^4$. Значит, в выражении для энергии системы существует член, убывающий как четвертая степень расстояния (это поправка к E_0). Эта энергия спадает с расстоянием медленнее, чем сдвиг A , даваемый формулой (8.10). На каких-то больших расстояниях R член с R^4 становится важнейшим, определяющим изменение энергии с R , и поэтому единственной оставшейся силой. Заметьте, что электростатический член для обоих базисных состояний имеет один знак (раз сила притягивает, то энергия отрицательна), а потому и для обоих стационарных состояний его знак один и тот же, в то время как член электронного обмена A для двух стационарных состояний дает разные знаки.

§ 2. Ядерные силы

Мы видели, что система, составленная из атома водорода и протона, вследствие обмена одним электроном обладает энергией взаимодействия, которая на больших расстояниях R

меняется как

$$\frac{e^{-\alpha R}}{R}, \quad (8.11)$$

где $\alpha = \sqrt{2mW_H}/\hbar$. (Обычно говорят, что происходит обмен «виртуальным» электроном, когда, как в нашем случае, электрон вынужден перепрыгивать через ту область, где его энергия оказалась бы отрицательной. Конкретнее говоря, «виртуальный обмен» означает, что явление предполагает квантовомеханическую интерференцию между состоянием без обмена и состоянием с обменом.)

А теперь следует задать такой вопрос: не может ли быть, что и силы, действующие между другими частицами, имеют сходное происхождение? Что, к примеру, можно сказать о ядерной силе, действующей между нейтроном и протоном или между двумя протонами? Пытаясь объяснить природу ядерных сил, Юкава предположил, что сила, действующая между двумя нуклонами, вызывается сходным обменным эффектом, только в этом случае из-за виртуального обмена не электроном, а какой-то новой частицей, которую он назвал «мезон». Сегодня мы бы отождествили мезон Юкавы с π -мезоном (или «пионом»), возникающим в высокозергетических столкновениях протонов или других частиц.

Посмотрим для примера, какого рода силы возникнут от того, что протон и нейтрон обменяются положительным пионом (π^+), имеющим массу m_π . Как атом водорода H^0 может, отказавшись от электрона e^- , превратиться в протон p^+



точно так же протон p^+ может перейти в нейтрон n^0 , отказавшись от π^+ -мезона:



Значит, если у нас есть протон (в точке a) и нейтрон (в точке b), разделенные расстоянием R , то протон может стать нейтроном, испуская π^+ -мезон, который затем поглощается нейтроном в точке b , обращая его в протон. И имеется энергия взаимодействия системы из двух нуклонов и одного пиона, зависящая от амплитуды A пионного обмена, как это было с электронным обменом в ионе H_2^+ .

В процессе (8.12) энергия атома H^0 (если вычислять ее нерелятивистски, опуская энергию поля электрона W_H) меньше энергии протона на величину mc^2 , так что кинетическая энергия электрона отрицательна — или импульс мнимый [см. уравнение (8.9)]. В ядерном процессе (8.13) массы протона и нейтрона почти равны, так что полная энергия π^+ -мезона окажется равной нулю. Соотношение между полной энергией E и

импульсом p пиона с массой m_π таково:

$$E^2 = p^2 c^2 + m_\pi^2 c^4.$$

Раз E равно нулю (или по крайней мере пренебрежимо мало по сравнению с m_π), то импульс опять выходит мнимый:

$$p = im_\pi c.$$

Повторяя знакомые нам уже рассуждения, с помощью которых мы вычисляли амплитуду того, что связанный электрон проникнет через барьер в пространстве между двумя протонами, мы получаем для ядерного случая амплитуду обмена A , которая — при больших R — будет вести себя как

$$\frac{e^{-i(m_\pi c/\hbar)R}}{R}. \quad (8.14)$$

Энергия взаимодействия пропорциональна A и, значит, меняется таким же образом. Мы получаем изменение энергии в форме так называемого *потенциала Юкавы* между двумя нуклонами. Кстати, ту же формулу мы получили раньше прямо из дифференциального уравнения для движения пиона в пустом пространстве [см. гл. 28 (вып. 6), уравнение (28.18)].

Следуя той же линии рассуждений, можно попытаться прикинуть взаимодействие двух протонов (или двух нейтронов), происходящее от обмена *нейтральными* пиянами (π^0). Основной процесс теперь таков:

$$p^+ \rightarrow p^+ + \pi^0. \quad (8.15)$$

Протон может испустить виртуальный π^0 , оставаясь после этого все еще протоном. Если протонов два, то протон № 1 может испустить виртуальный π^0 , который поглотится протоном № 2. В конце остается опять пара протонов. Это немного не то, что было в случае иона H_2^+ . Тогда H^0 переходил после испускания электрона в другое состояние — в протон. Теперь же мы предполагаем, что протон может испускать π^0 , не меняя своего характера. Такие процессы и впрямь наблюдаются в высокoenергетических столкновениях. Процесс аналогичен тому, как электрон, испуская фотон, остается все же электроном:

$$e \rightarrow e + \text{фотон}. \quad (8.16)$$

Мы не «видим» фотонов внутри электрона до того, как они испускаются, или после того, как они поглощаются, и их «испускание» не изменяет «природы» электрона.

Вернемся к нашей паре протонов. Между ними существует взаимодействие из-за наличия амплитуды A — амплитуды того, что один из протонов испускает нейтральный пийон, который проскаивает (с мнимым импульсом) к другому протону и там поглощается. Амплитуда эта опять пропорциональна

(8.14), но m_x — теперь масса нейтрального пиона. Сходные рассуждения приводят к такому же взаимодействию между двумя нейтронами. А раз ядерные силы (в пренебрежении электрическими эффектами), действующие между нейтроном и протоном, между протоном и протоном, между нейтроном и нейтроном, одинаковы, то мы приходим к заключению, что массы заряженного и нейтрального ционов обязаны быть равны между собой. И экспериментально оказывается, что массы действительно очень близки друг к другу, а небольшая разница между ними — это примерно то, что и следует из поправок на собственную энергию [см. гл. 28 (вып. 6)].

Существуют и другие виды частиц, скажем K -мезоны, которыми могут обмениваться два нуклона. Допустим также и одновременный обмен двумя пиянами. Но у всех этих прочих обмениваемых «объектов» масса покоя m_x выше массы пиона m_π , что приводит к членам в амплитуде обмена, изменяющимся как

$$\frac{e^{-(m_x c^2/\hbar) R}}{R}.$$

Такие члены с ростом R отмирают быстрее, чем одномезонный член. Сегодня еще никто не знает, как вычислять эти члены с большей массой, но для достаточно высоких значений R выживает только однопионный член. И действительно, те опыты, в которых играет роль только взаимодействие на больших расстояниях, свидетельствуют, что энергия взаимодействия именно такова, как предсказывает теория однопионного обмена.

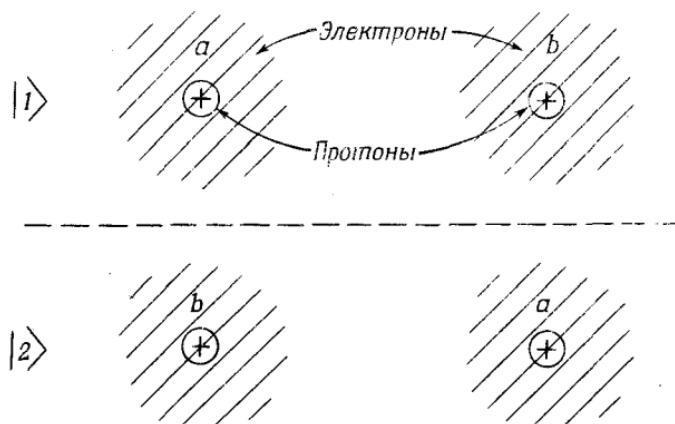
В классической теории электричества и магнетизма кулоновское электростатическое взаимодействие и излучение света ускоряемым зарядом тесно связаны — оба они вытекают из уравнений Максвелла. Мы видели, что в квантовой теории свет может быть представлен как квантовые возбуждения гармонических колебаний классического электромагнитного поля в ящике. С другой стороны, квантовая теория может быть построена при помощи описания света как частиц — фотонов, подчиняющихся статистике Бозе. В гл. 2, § 5, мы подчеркнули, что обе эти взаимоисключающие точки зрения всегда приводят к одинаковым предсказаниям. Может ли вторая точка зрения быть проведена последовательно и до конца, так чтобы в нее вошли все электромагнитные эффекты? В частности, если мы хотим описать электромагнитное поле полностью на языке бозе-частиц, т. е. фотонов, то чем будет вызвана сила Кулона?

С точки зрения «частиц» кулоновское взаимодействие между двумя электронами *вытекает из обмена виртуальными фотонами*. Один из электронов испускает фотон [как в реакции (8.16)], который переходит к другому электрону и там поглощается, — та же реакция идет в обратную сторону. Энергия

взаимодействия снова дается формулой типа (8.14), но теперь m_π заменяется массой покоя фотона, которая равна нулю. Значит, виртуальный обмен фотоном приводит к энергии взаимодействия, которая меняется просто обратно пропорционально R — расстоянию между электронами — в точности, как нормальная кулоновская потенциальная энергия! В «частичной» (от слова частица) теории электромагнетизма процесс обмена виртуальным фотоном приводит ко всем явлениям электростатики.

§ 3. Молекула водорода

В качестве очередной системы с двумя состояниями рассмотрим нейтральную молекулу водорода H_2 . В ней, естественно, труднее разобраться, потому что там имеются два электрона. Мы опять начнем с рассуждений о том, что происходит, когда оба протона достаточно удалены друг от друга. Но теперь к ним следует добавить еще два электрона. Чтобы удобнее было следить за ними, назовем их «электрон a » и «электрон b ». Здесь опять можно себе вообразить два мыслимых состояния. Одна возможность: «электрон a » размазан вокруг первого протона, а «электрон b » — вокруг второго (фиг. 8.4). Получаются по-просту два атома водорода. Это состояние назовем $|1\rangle$. Но есть и другая возможность: вокруг первого протона размазан «электрон b », а вокруг второго — «электрон a ». Это состояние обозначим $|2\rangle$. Из-за симметрии эти две возможности обязаны быть энергетически эквивалентными, но, как мы увидим, энергия системы *не есть* просто энергия двух атомов водорода.



Фиг. 8.4. Совокупность базисных состояний для молекулы H_2 .

Нужно заметить, что имеются многие другие возможности. Например, «электрон *a*» может находиться близ первого протона, а «электрон *b*» — в другом состоянии вокруг *того же* протона. Мы не станем рассматривать такой случай, поскольку его энергия заведомо будет больше (из-за сильного кулоновского отталкивания между двумя электронами). Для большей точности, конечно, стоило бы учесть и такие состояния; но уже из рассмотрения одной только пары состояний, показанных на фиг. 8.4, мы узнаем самое главное о молекулярной связи. В этом приближении мы можем описать всякое состояние, задав амплитуду $\langle I | \varphi \rangle$ быть в состоянии $| I \rangle$ и амплитуду $\langle 2 | \varphi \rangle$ быть в состоянии $| 2 \rangle$. Иными словами, вектор состояния $| \varphi \rangle$ может быть записан в виде линейной комбинации

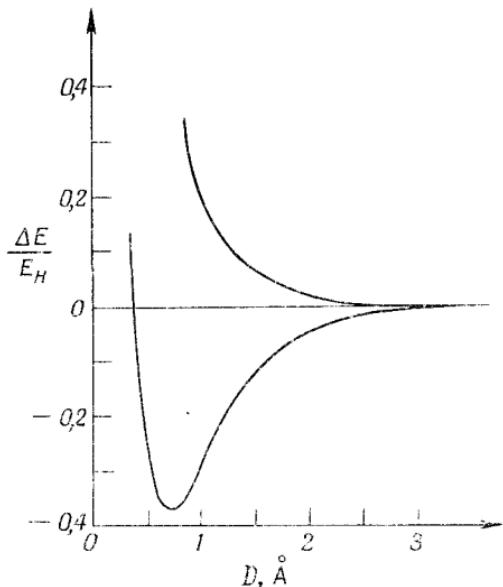
$$| \varphi \rangle = \sum_i | i \rangle \langle i | \varphi \rangle.$$

Для дальнейшего, как всегда, предположим, что имеется некоторая амплитуда *A* того, что электроны могут проходить через промежуточное пространство и обмениваться местами. Эта возможность обмена означает, что энергия системы, как мы наблюдали и в других системах с двумя состояниями, расщеплена. Как и у молекулярного иона водорода, расщепление очень мало, когда расстояние между протонами велико. А когда протоны сближаются, возрастает амплитуда переходов электронов туда-сюда, а вместе с ней растет и расщепление. Убывание энергии в нижнем состоянии означает, что имеется сила притяжения, сближающая атомы. И опять, когда протоны сблизятся особенно тесно, уровень энергии поднимутся вследствие кулоновского отталкивания. В итоге энергии двух стационарных состояний будут меняться с расстоянием так, как показано на фиг. 8.5. На расстоянии порядка 0,74 Å низший энергетический уровень достигает минимума; это и есть расстояние между протонами в настоящей молекуле водорода.

Но у вас уже, вероятно, появилось возражение. А как же быть с тем, что оба электрона — тождественные частицы? Мы их назвали «электрон *a*» и «электрон *b*», но на самом-то деле невозможно сказать, кто из них кто. И мы еще говорили в гл. 2, что если за счет обмена электронами (ферми-частицами) имеются два пути, по которым что-то может произойти, то две амплитуды будут интерферировать с *отрицательным* знаком. Это значит, что если у электронов переставить обозначающие их номера, то знак амплитуды должен перемениться. Однако мы только что пришли к выводу, что связанное состояние молекулы водорода имело бы вид (при $t=0$)

$$| II \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (| 1 \rangle + | 2 \rangle).$$

Фиг. 8.5. Уровни энергии молекулы H_2 для различных межпротонных расстояний D ($E_H = 13,6 \text{ эв}$).



А согласно нашим правилам, перечисленным в гл. 2, такое состояние недопустимо. Если переставить номера электронов, то мы получим состояние

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |1\rangle),$$

и знак выйдет тот же, а не обратный.

Эти рассуждения верны, но только тогда, когда *спины обоих электронов одинаковы*. Если у них обоих спины смотрят вверх (или вниз), то единственное допустимое состояние таково:

$$|I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle).$$

Для этого состояния перестановка электронов дает

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |1\rangle),$$

что, как и положено, равно $-|I\rangle$. Значит, если сблизить два атома водорода так, чтобы их электроны врашались глядя в одну сторону, то они смогут перейти лишь в состояние $|I\rangle$, но не в состояние $|II\rangle$. Но заметьте теперь, что состояние $|I\rangle$ — это *верхнее* энергетическое состояние. Его кривая «энергия — расстояние» не имеет минимума. Два атома водорода всегда будут отталкиваться и не смогут образовать молекулу. Мы заключаем, что молекула водорода, в которой спины электронов параллельны, не способна существовать. И это на самом деле так.

С другой стороны, наше состояние $|II\rangle$ полностью симметрично по двум электронам. Действительно, если переименовать электроны, назвав первый a , а второй b , то мы снова получим

в точности то же состояние. В гл. 2, § 7, мы видели, что если две ферми-частицы находятся в одном и том же состоянии, то спины их обязаны быть противоположными. Значит, у связанный молекулы водорода спин одного из электронов должен быть направлен вверх, а спин другого — вниз.

Весь рассказ о молекуле водорода на самом деле будет звучать еще более запутанно, если мы захотим включить в него спины протонов. Тогда уже будет нельзя считать молекулу системой с *двумя* состояниями. Она скорее должна походить на систему с *восемью* состояниями — для каждого из наших состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ возможны четыре различные расстановки спинов, так что, пренебрегая спинами, мы слегка упростили дело. Наши окончательные выводы, однако, все равно верны.

Мы нашли, что в низшем энергетическом состоянии молекулы H_2 — единственном связанным состоянию — спины двух электронов противоположны друг другу. Поэтому спиновый момент количества движения электронов равен нулю. Наоборот, два близких атома водорода с параллельными спинами (и, стало быть, с полным моментом количества движения \hbar) должны находиться в высшем (несвязанном) энергетическом состоянии; атомы будут отталкиваться. Налицо интересная корреляция между спинами и энергиями. Она еще раз иллюстрирует то, о чем мы упоминали раньше: что выходит, будто у двух спинов существует энергия «иззаимодействия», потому что случай параллельных спинов обладает большей энергией, чем случай спинов антипараллельных. В каком-то смысле можно говорить, что спины стремятся выстроиться в антипараллельное положение и, стремясь к этому, обладают потенциалом к высвобождению энергии не из-за того, что там имеется большая магнитная сила, а из-за принципа запрета.

В § 1 мы видели, что связь двух различных ионов посредством одного электрона чаще всего оказывается весьма слабой. При двухэлектронной связи это *не так*. Представим, что два протона на фиг. 8.4 мы заменили любой парой ионов (с замкнутыми внутренними электронными оболочками и единичным ионным зарядом) и что энергии связи электрона в этих двух ионах различны. Энергии состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ по-прежнему будут равны друг другу, потому что в каждом из этих состояний имеется по одному электрону на каждый ион. Поэтому у нас всегда будет расщепление, пропорциональное A . Двухэлектронная связь поистине вездесуща — это самая обычная валентная связь. Химическая связь, как правило, предполагает эту игру в «туда-сюда», в которую играют два электрона. Хотя пара атомов может быть связана только одним электроном, это случается сравнительно редко, потому что требует надлежащих условий.

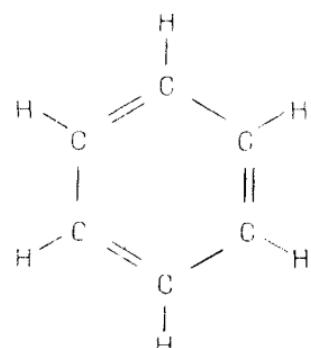
Наконец, надо заметить, что если энергия притяжения электрона к одному ядру намного больше, чем к другому, то уже

нельзя говорить, будто можно игнорировать другие мыслимые состояния. Пусть ядро *a* (это может быть и положительный ион) притягивает электрон намного сильнее, чем ядро *b*. Это сильное притяжение может более чем компенсировать взаимное отталкивание двух электронов. И если это так, то низшее энергетическое состояние может обладать большой амплитудой того, что оба электрона окажутся возле *a* (образуя отрицательный ион), и малой амплитудой того, что хотя бы один из них обнаружится возле *b*. Состояние выглядит как отрицательный ион рядом с положительным ионом. Именно это и случается в «ионных» молекулах наподобие NaCl. Вы видите, что мыслимы любые градации между ковалентной связью и ионной связью.

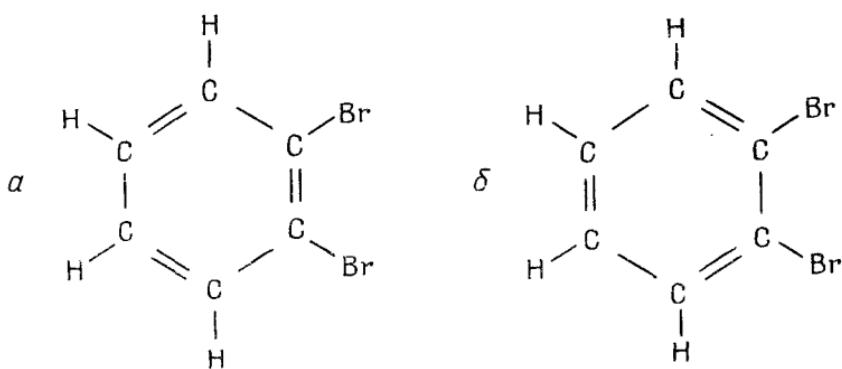
Теперь вы ясно видите, что многие химические факты на квантовомеханическом языке удается очень отчетливо понять.

§ 4. Молекула бензола

Для изображения сложных органических молекул химики изобрели изящные диаграммы. Мы хотим теперь поговорить об одной из самых интересных молекул — о молекуле бензола, диаграмма которой приведена на фиг. 8.6. В нее входят по шести весьма симметрично расположенных атомов углерода и водорода. Каждая черточка на диаграмме представляет *пару* электронов с противоположными спинами, пляшущих танец ковалентной связи. Каждый атом водорода вводит в игру по одному электрону, а каждый атом углерода — по четыре, образуя в общей сложности систему из 30 участвующих в игре электронов. (В углероде ближе к ядру есть еще два электрона, образующих первую, или *K*, оболочку. Они не показаны, поскольку их связь столь тесна, что сколько-нибудь заметной важности для ковалентной связи они не представляют.) Итак, каждая черточка на рисунке представляет *связь*, или пару электронов, а двойные связи означают, что между чередующимися парами атомов углерода имеются по *две пары* электронов.



Фиг. 8.6. Молекула бензола C_6H_6 .



Фиг. 8.7. Две возможности для орто-дивромбензола.

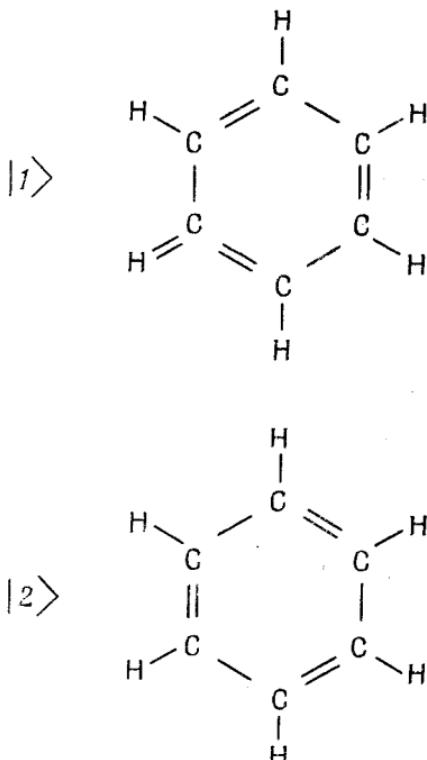
Два атома брома могут разделяться либо одинарной связью, либо двойной.

С молекулой бензола связана одна загадка. Можно подсчитать, какая энергия должна потребоваться на образование этого химического соединения, потому что химики измерили энергии различных соединений, включающих части кольца; к примеру, изучая этилен, они узнали энергию двойной связи и т. д. Поэтому мы можем подсчитать полную энергию, которую должна была бы иметь молекула бензола. Однако истинная энергия бензольного кольца намного меньше, чем получается при таком подсчете: кольцо связано куда крепче, чем полагается обычной системе «ненасыщенных двойных связей». Как правило, система двойных связей, не образующая подобного кольца, весьма легко поддается химическим атакам: ее энергия сравнительно высока, и, добавляя лишние атомы водорода, двойные связи удается легко разрывать. Не то у бензола — кольцо его почти нерушимо: сломать его нелегко. Иными словами, энергия бензола намного ниже, чем дает подсчет по картине двойных связей.

Имеется еще и другая загадка. Пусть мы заменили два смежных водорода атомами брома, образуя орто-дивромбензол. Это можно сделать двумя путями. Атомы брома могут быть на противоположных концах двойной связи (фиг. 8.7, а) или могут быть на противоположных концах одинарной связи (фиг. 8.7, δ). Можно было бы подумать, что должны существовать две разные формы орто-дивромбензола, но это не так. Есть только одно такое вещество *.

* Мы немного упрощаем дело. Первоначально химики думали, что должны существовать четыре формы дивромбензола: две формы с атомами брома при соседних атомах углерода (орт-дивромбензол), третья форма с атомами брома при атомах углерода, идущих через один (мета-дивромбензол), и четвертая форма с атомами брома, стоящими друг против друга (пара-дивромбензол). Однако отыскали они только три формы — существует лишь одна форма орто-молекулы.

Фиг. 8.8. Совокупность базисных состояний для молекулы бензола.



Теперь мы собираемся разрешить эти загадки, и вы, может быть, уже догадались как: конечно, дело в том, что «основное состояние» бензольного кольца на самом деле является системой с двумя состояниями. Можно представить себе, что связи в бензоле могут быть расположены двояким образом, как показано на фиг. 8.8. Вы скажете: «Но ведь это одно и то же; у них должна быть одинаковая энергия». Конечно, должна быть. Именно поэтому их и надо анализировать как систему с двумя состояниями. Каждое состояние представляет другую конфигурацию всей совокупности электронов, и существует некоторая амплитуда A того, что все переплетение переключится с одного расположения на другое, есть какой-то шанс, что электроны смогут сменить фигуру в танце.

Как мы видели, эта вероятность переброса приводит к смешанному состоянию, энергия которого ниже, чем получилось бы, если бы мы рассчитали каждую из схем, представленных на фиг. 8.8, по отдельности. Вместо этого существуют два стационарных состояния: одно с энергией выше, другое — ниже ожидаемого значения. Значит, в действительности истинное нормальное состояние бензола (с наименьшей энергией) не есть какая-либо из возможностей, представленных на фиг. 8.8, а обладает амплитудой $1/\sqrt{2}$ пребывания в каждом из нарисо-

ванных состояний. Это единственное состояние, которое и стоит принимать в расчет в химии бензола при нормальных температурах. Кстати, существует и верхнее состояние; мы вправе так говорить, потому что бензол обладает сильным поглощением света в ультрафиолетовой области с частотой $\omega = (E_1 - E_{11})/\hbar$. Вспомните, что в аммиаке, где прыгающим вверх и вниз объектом являлась тройка протонов, расстояние между энегриями приходилось на микроволновую область. В бензоле таким объектом являются электроны, и, поскольку они намного легче, им и перескакивать туда-сюда тоже намного легче, отчего и коэффициент A становится куда больше. В итоге разница энергий намного больше — около 1,5 эв, а это энергия ультрафиолетового фотона *.

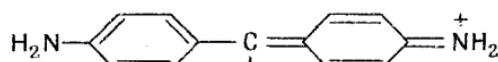
Что же происходит, когда мы присоединяем бром? Тогда опять возникают две возможности с двумя разными электронными конфигурациями, показанные на фиг. 8.7. Отличие их в том, что те два базисных состояния, из которых мы исходим, обладают теперь слегка различными энергиями. В стационарное состояние с наименьшей энергией по-прежнему войдет линейная комбинация двух состояний, но с неравными амплитудами. Для состояния $|1\rangle$ амплитуда может стать равной, скажем, $\sqrt{2/3}$, для состояния $|2\rangle$ она будет $\sqrt{1/3}$; чтобы знать коэффициенты точно, нужна добавочная информация, но, во всяком случае, если уж энергии H_{11} и H_{22} не равны друг другу, то и амплитуды C_1 и C_2 не могут быть равны между собой. Это, естественно, означает, что одна из двух изображенных на рисунке возможностей более вероятна, чем другая, но все же электроны достаточно подвижны, чтобы и та, и другая обладали какой-то конечной амплитудой. У другого стационарного состояния амплитуды другие (скажем, $\sqrt{1/3}$ и $-\sqrt{2/3}$), но оно лежит при более высокой энергии. Есть только одно наименее состояние, а не два, как можно было бы подумать, пользуясь наивной теорией закрепленных химических связей.

* Сказанное нами может вас слегка ввести в заблуждение. Поглощение ультрафиолетового света в принятой нами для бензола системе с двумя состояниями было бы очень слабым, потому что матричный элемент дипольного момента между двумя состояниями равен нулю. [Оба состояния электрически симметричны, и в нашей формуле (7.55) для вероятности перехода дипольный момент μ равен нулю, и свет не поглощается.] Если бы других состояний не было, существование верхнего состояния пришлось бы доказывать иными путями. Однако более полная теория бензола, которая исходит из большего числа базисных состояний (обладающих, скажем, смежными двойными связями), показывает, что истинные стационарные состояния бензола слегка искажены по сравнению с найденными нами. В результате все же возникает дипольный момент, который и разрешает упомянутые в тексте переходы, приводящие к поглощению ультрафиолетового света.

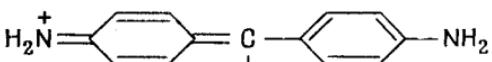
§ 5. Красители

Приведем еще один химический пример явления, связанного с двумя состояниями, но на этот раз на уровне крупных молекул. Касается это теории красителей. У многих красителей, а именно у большинства искусственных красителей, есть одна общая характеристика — они обладают своего рода симметрией. На фиг. 8.9 изображен ион одного из красителей — фуксина (он дает пурпурный цвет). В молекуле есть три кольцевые структуры, две из которых — бензольные кольца. Третья не совсем совпадает с бензольным кольцом, потому что внутри кольца в ней только две двойные связи. На рисунке показаны две в равной степени подходящие схемы, и мы догадываемся, что их энергии должны быть равны. Но имеется еще и амплитуда того, что все электроны смогут переброситься из одного состояния в другое, передвинув местоположение «незаполненного» кольца в другой конец. Когда электронов так много, то амплитуда переброса несколько ниже, чем у бензола, и различие в энергиях двух стационарных состояний не так велико. Но тем не менее все равно имеется обычная пара стационарных состояний $|I\rangle$ и $|II\rangle$, представляющая собой сумму и разность двух базисных состояний, показанных на рисунке. Энергетический промежуток между $|I\rangle$ и $|II\rangle$ оказывается равным энергии фотона в оптической области. Если молекулу осветить, возникает очень сильное поглощение при некоторой частоте и молекула покажется ярко окрашенной. Вот почему она краситель!

Другая интересная черта такой молекулы красителя — в двух изображенных базисных состояниях центры электрического заряда расположены в разных местах. В итоге молекула должна быть сильно подвержена действию внешнего электрического поля. Такой же эффект мы наблюдали в молекуле аммиака. Ясно, что его можно анализировать при помощи той же математики, если только известны числа E_0 и A . Их, вообще говоря,



$|1\rangle$



$|2\rangle$



Фиг. 8.9. Пара базисных состояний для молекулы красителя фуксин.

получают, накапливая опытные данные. Если проделать измерения со многими красителями, то часто можно догадаться, что произойдет с какой-то родственной молекулой красителя. Из-за сильного сдвига местоположения центра электрического заряда значение μ в формуле (7.55) велико, и вещество обладает большой вероятностью поглощения света с характеристической частотой $2A/\hbar$. Значит, вещество не просто окрашено, а окрашено очень густо — малое количество вещества поглощает много света.

Скорости переброса (и тем самым A) очень чувствительны ко всей структуре молекулы. Если изменить A , то изменится расщепление энергии и вместе с ним цвет красителя. Кроме того, молекулы не обязаны быть совершенно симметричными. Мы видели, что то же самое основное явление бывает и при небольших видоизменениях — даже когда имеется небольшая асимметрия. Небольшого изменения цвета можно добиваться введением в молекулы легких асимметрий. Так, другой важный краситель, малахитовая зелень, очень похож на фуксин, только у него две из имеющихся молекул водорода замещены на CH_3 . Цвет выходит другой, потому что A сдвинуто и скорость переброса электронов изменилась.

§ 6. Гамильтониан частицы со спином $1/2$ в магнитном поле

Обратимся теперь еще к одной системе с двумя состояниями. На этот раз нашим объектом будет частица со спином $1/2$. Кое-что из того, что мы намерены сказать, затрагивалось уже в предыдущих главах, но повторение поможет нам немного прояснить кое-какие темные места. Покоящийся электрон мы можем считать тоже системой с двумя состояниями. Хотя в этом параграфе мы будем толковать об «электроне», но то, что мы выясним, будет справедливо по отношению ко *всякой* частице со спином $1/2$.

Предположим, что в качестве наших базисных состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ мы выбрали состояния, в которых z -компоненты спина электрона равна либо $+\hbar/2$, либо $-\hbar/2$. Эти состояния, конечно, те же самые состояния (+) и (-), с которыми мы встречались в прежних главах. Чтобы согласовать эти и прежние обозначения, спиновое состояние $|1\rangle$ мы будем отмечать «плюсом», а спиновое состояние $|2\rangle$ — «минусом», причем «плюс» и «минус» относятся к моменту количества движения в направлении z .

Всякое мыслимое состояние $|\psi\rangle$ электрона можно описать уравнением (8.1), задав амплитуду C_1 того, что электрон находится в состоянии $|1\rangle$, и амплитуду C_2 того, что он находится в состоянии $|2\rangle$. Для этого нам понадобится гамильтониан нашей системы с двумя состояниями — электрона в магнитном

поле. Начнем с частного случая магнитного поля в направлении z .

Пусть вектор \mathbf{B} имеет только z -компоненту B_z . Из определения двух базисных состояний (что их спины параллельны и антипараллельны \mathbf{B}) мы знаем, что они уже являются стационарными состояниями — состояниями с определенной энергией в магнитном поле. Состояние $|1\rangle$ соответствует энергии*, равной $-\mu B_z$, а состояние $|2\rangle$ — энергии $+\mu B_z$. В этом случае гамильтониан должен быть очень простым, поскольку на C_1 — амплитуду оказаться в состоянии $|1\rangle$ C_2 не влияет и наоборот:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dC_1}{dt} &= E_1 C_1 = -\mu B_z C_1, \\ i\hbar \frac{dC_2}{dt} &= E_2 C_2 = +\mu B_z C_2. \end{aligned} \quad (8.17)$$

В этом частном случае гамильтониан равен

$$\begin{aligned} H_{11} &= -\mu B_z, & H_{12} &= 0, \\ H_{21} &= 0, & H_{22} &= +\mu B_z. \end{aligned} \quad (8.18)$$

Итак, мы знаем, какой вид имеет гамильтониан, когда магнитное поле направлено по z , и знаем еще энергии стационарных состояний.

А теперь пусть поле *не направлено* по z . Каков теперь гамильтониан? Как меняются матричные элементы, когда поле не направлено по z ? Мы сделаем предположение, что для членов гамильтониана имеется своего рода принцип суперпозиции. Точнее, мы предположим, что если два магнитных поля налагаются одно на другое, то члены гамильтониана просто складываются: если нам известно H_{ij} для поля, состоящего из одной только компоненты B_z , и известно H_{ij} для одной только B_x , то H_{ij} для поля с компонентами B_z, B_x получится простым сложением. Это бесспорно верно, если рассматриваются только поля в направлении z : если удвоить B_z , то удваиваются и все H_{ij} . Итак, давайте допустим, что H линейно по полю \mathbf{B} . Чтобы найти H_{ij} для какого угодно магнитного поля, больше ничего и не нужно.

Пусть у нас есть постоянное поле \mathbf{B} . Мы бы могли провести нашу ось z в направлении поля и обнаружили бы два стационарных состояния с энергиями $\mp\mu B$. Простой выбор другого направления осей не изменил бы физики дела. Наше описание стационарных состояний стало бы иным, но их энергии

* Мы принимаем энергию покоя m_0c^2 за «нуль» энергии и считаем магнитный момент μ электрона *отрицательным* числом, поскольку он направлен против спина.

по-прежнему были бы $\mp \mu B$, т. е.

$$E_I = -\mu \sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2} \quad (8.19)$$

и

$$E_{II} = +\mu \sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}.$$

Дальше все уже совсем легко. У нас есть формулы для энергий. Нам нужен гамильтониан, линейный по B_x , B_y и B_z , который даст именно такие энергии, если применить нашу общую формулу (8.3). Задача — найти гамильтониан. Прежде всего заметим, что энергия расщепляется симметрично и ее среднее значение есть нуль. Взглянув на (8.3), мы сразу же увидим, что для этого требуется

$$H_{22} = -H_{11}.$$

(Заметьте, что это подтверждается тем, что нам уже известно при $B_x = B_y = 0$; в этом случае $H_{11} = -\mu B_z$ и $H_{22} = \mu B_z$.) Если теперь приравнять энергию из (8.3) к тому, что нам известно из (8.19), то получится

$$\left(\frac{H_{11} - H_{22}}{2}\right)^2 + |H_{12}|^2 = \mu^2 (B_x^2 + B_y^2 + B_z^2). \quad (8.20)$$

(Мы использовали также тот факт, что $H_{21} = H_{12}^*$, так что $H_{12} H_{21}$ может быть записано в виде $|H_{12}|^2$.) Опять в частном случае поля в направлении z это даст

$$\mu^2 B_z^2 + |H_{12}|^2 = \mu^2 B_z^2,$$

откуда $|H_{12}|$ в этом частном случае равно нулю, что означает, что в H_{12} не может войти член с B_z . (Вы помните, что мы говорили о линейности всех членов по B_x , B_y и B_z .)

Итак, пока мы узнали, что в H_{11} и H_{22} входят члены с B_z , а в H_{12} и H_{21} — нет. Можно попробовать угадать формулы, которые будут удовлетворять уравнению (8.20), написав

$$H_{11} = -\mu B_z,$$

$$H_{22} = \mu B_z$$

и

$$|H_{12}|^2 = \mu^2 (B_x^2 + B_y^2). \quad (8.21)$$

Оказывается, что никак иначе этого сделать нельзя!

«Погодите, — скажете вы, — H_{12} по B не линейно. Из (8.21) следует, что $H_{12} = \mu \sqrt{B_x^2 + B_y^2}$. Не обязательно. Есть и другая возможность, которая уже линейна, а именно

$$H_{12} = \mu (B_x + iB_y).$$

На самом деле таких возможностей не одна, в общем случае можно написать

$$H_{12} = \mu (B_x \pm iB_y) e^{i\delta},$$

где δ — произвольная фаза.

Какой же знак и какую фазу мы обязаны взять? Оказывается, что можно выбрать любой знак и фазу тоже любую, а физические результаты от этого не изменятся. Так что выбор — это вопрос соглашения. Еще до нас кто-то решил ставить знак минус и брать $e^{i\delta} = -1$. Мы можем делать так же и написать

$$H_{12} = -\mu (B_x - iB_y), \quad H_{21} = -\mu (B_x + iB_y).$$

(Кстати, эти соглашения связаны и согласуются с тем произволом в выборе фаз, который мы использовали в гл. 4.)

Полный гамильтониан для электрона в произвольном магнитном поле, следовательно, равен

$$\begin{aligned} H_{11} &= -\mu B_z, & H_{12} &= -\mu (B_x - iB_y), \\ H_{21} &= -\mu (B_x + iB_y), & H_{22} &= +\mu B_z. \end{aligned} \quad (8.22)$$

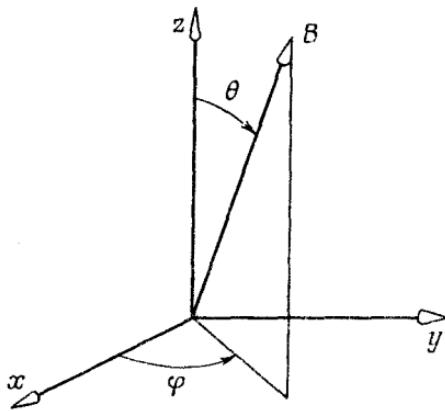
А уравнения для амплитуд C_1 и C_2 таковы:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dC_1}{dt} &= -\mu [B_z C_1 + (B_x - iB_y) C_2], \\ i\hbar \frac{dC_2}{dt} &= -\mu [(B_x + iB_y) C_1 - B_z C_2]. \end{aligned} \quad (8.23)$$

Итак, мы открыли «уравнения движения спиновых состояний» электрона в магнитном поле. Мы угадали их, пользуясь некоторыми физическими аргументами, но истинная проверка всякого гамильтониана заключается в том, что он обязан давать предсказания, согласующиеся с экспериментом. Из всех сделанных проверок следует, что эти уравнения правильны. Более того, хотя все наши рассуждения относились к постоянному полю, написанный нами гамильтониан правилен и тогда, когда магнитные поля меняются со временем. Значит, мы теперь можем применять уравнения (8.23) для решения всевозможных интересных задач.

§ 7. Вращающийся электрон в магнитном поле

Пример первый: пусть сначала имеется постоянное поле в направлении z . Ему соответствуют два стационарных состояния с энергиями $\mp\mu B_z$. Добавим небольшое поле в направлении x . Тогда уравнения получатся такими же, как в нашей старой задаче о двух состояниях. Опять, в который раз, получается знакомый уже нам переброс, и уровни энергии немного расщепляются. Пусть, далее, x -компоненты поля начнут меняться во



Фиг. 8.10. Направление \mathbf{B} определяется полярным углом θ и азимутальным углом φ .

времени, скажем, как $\cos \omega t$. Тогда уравнения станут такими, как для молекулы аммиака в колеблющемся электрическом поле (см. гл. 7). И тем же способом, что и прежде, вы можете рассчитать процесс во всех деталях. При этом вы увидите, что колеблющееся поле приводит к переходам от $+z$ -состояния к $-z$ -состоянию и обратно, если только горизонтальное поле колеблется с частотой, близкой к резонансной, $\omega_0 = 2\mu B_z / \hbar$. Это приводит к квантовомеханической теории явлений магнитного резонанса, описанной нами в гл. 35 (вып. 7).

Можно еще сделать мазер, в котором используется система со спином $1/2$. Прибор Штерна — Герлаха создает пучок частиц, поляризованных, скажем, в направлении $+z$, и они потом направляются в полость, находящуюся в постоянном магнитном поле. Колеблющиеся в полости поля, взаимодействуя с магнитным моментом, вызовут переходы, которые будут снабжать полость энергией.

Рассмотрим теперь второй пример. Пусть у нас имеется магнитное поле \mathbf{B} , направление которого характеризуется полярным углом θ и азимутальным углом φ (фиг. 8.10). Допустим еще, что имеется электрон, спин которого направлен по полю. Чему равны амплитуды C_1 и C_2 для этого электрона? Иными словами, обозначая состояние электрона $|\psi\rangle$, мы хотим написать

$$|\psi\rangle = |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2,$$

где C_1 и C_2 равны

$$C_1 = \langle 1 | \psi \rangle, \quad C_2 = \langle 2 | \psi \rangle,$$

а $|1\rangle$ и $|2\rangle$ обозначают то же самое, что раньше обозначалось $|+\rangle$ и $|-\rangle$ (по отношению к выбранной нами оси z).

Ответ на этот вопрос также содержится в наших общих уравнениях для систем с двумя состояниями. Во-первых, мы знаем, что раз спин электрона параллелен \mathbf{B} , то электрон находится в стационарном состоянии с энергией $E_l = -\mu B$. Поэтому

и C_1 , и C_3 должны изменяться как $e^{-iE_I t/\hbar}$ [см. уравнение (7.18)]; и их коэффициенты a_1 и a_2 даются формулой (8.5):

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{H_{12}}{E_I - H_{11}}. \quad (8.24)$$

В добавок a_1 и a_2 должны быть нормированы так, чтобы было $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$. Величины H_{11} и H_{12} мы можем взять из (8.22), используя равенства

$$B_z = B \cos \theta, \quad B_x = B \sin \theta \cos \varphi, \quad B_y = B \sin \theta \sin \varphi.$$

Тогда мы имеем

$$\begin{aligned} H_{11} &= -\mu B \cos \theta, \\ H_{12} &= -\mu B \sin \theta (\cos \varphi - i \sin \varphi). \end{aligned} \quad (8.25)$$

Кстати, скобка во втором уравнении есть просто $e^{-i\varphi}$, так что проще писать

$$H_{12} = -\mu B \sin \theta e^{-i\varphi}. \quad (8.26)$$

Подставляя эти матричные элементы в (8.24) и сокращая на $-\mu B$, находим

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{\sin \theta e^{-i\varphi}}{1 - \cos \theta}. \quad (8.27)$$

Зная это отношение и зная условие нормировки, можно найти и a_1 , и a_2 . Сделать это нетрудно, но мы сократим путь, прибегнув к одному трюку. Известно, что $1 - \cos \theta = 2 \sin^2(\theta/2)$ и $\sin \theta = 2 \sin(\theta/2) \cos(\theta/2)$. Значит, (8.27) совпадает с

$$\frac{a_1}{a_2} = \frac{\cos(\theta/2) e^{-i\varphi}}{\sin(\theta/2)}. \quad (8.28)$$

Один из ответов, следовательно, таков:

$$a_1 = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi}, \quad a_2 = \sin \frac{\theta}{2}. \quad (8.29)$$

Он удовлетворяет и уравнению (8.28), и условию

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1.$$

Вы знаете, что умножение a_1 и a_2 на произвольный фазовый множитель ничего не меняет. Обычно формуле (8.29) предпочитают более симметричную запись, умножая на $e^{i\varphi/2}$. Принято писать так:

$$a_1 = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2}, \quad a_2 = \sin \frac{\theta}{2} e^{+i\varphi/2}. \quad (8.30)$$

Это и есть ответ на наш вопрос. Числа a_1 и a_2 — это амплитуды того, что электрон будет замечен спином вверх или вниз (по отношению к оси z), если известно, что его спин направлен

вдоль оси (θ, ϕ) . [Амплитуды C_1 и C_2 равны просто a_1 и a_2 , умноженным на $e^{-iE_J t/\hbar}$.]

Заметьте теперь занятую вещь. Напряженность B магнитного поля нигде в (8.30) не появляется. Тот же результат, разумеется, получится в пределе, если поле B устремить к нулю. Это означает, что мы дали общий ответ на вопрос, как представлять частицу, спин которой направлен вдоль произвольной оси. Амплитуды (8.30) — это проекционные амплитуды для частиц со спином $\frac{1}{2}$, подобные проекционным амплитудам для частиц со спином 1, приведенным в гл. 3 [уравнения (3.38)]. Теперь мы сможем находить для фильтрованных пучков частиц со спином $\frac{1}{2}$ амплитуды проинновения через тот или иной фильтр Штерна — Герлаха.

Пусть $|+z\rangle$ представляет состояние со спином, направленным по оси z вверх, а $| -z\rangle$ — состояние со спином вниз. Если $|+z'\rangle$ представляет состояние со спином, направленным вверх по оси z' , образующей с осью z углы θ и ϕ , то в обозначениях гл. 3 мы имеем

$$\langle +z | +z' \rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\Phi/2}, \quad \langle -z | +z' \rangle = \sin \frac{\theta}{2} e^{+i\Phi/2}. \quad (8.31)$$

Эти результаты эквивалентны тому, что мы нашли из чисто геометрических соображений в гл. 4 [уравнение (4.36)]. (Если вы в свое время решили пропустить гл. 4, то вот перед вами один из ее существенных результатов.)

Напоследок вернемся еще раз к тому примеру, о котором уже не раз говорилось. Рассмотрим такую задачу. Сперва имеется электрон с определенным образом направленным спином, затем на 25 минут включается магнитное поле в направлении z , а затем выключается. Каким окажется конечное состояние? Опять представим состояние в виде линейной комбинации $|\psi\rangle = |1\rangle C_1 + |2\rangle C_2$. Но в нашей задаче состояния с определенной энергией являются одновременно нашими базисными состояниями $|1\rangle$ и $|2\rangle$. Значит, C_1 и C_2 меняются только по фазе. Мы знаем, что

$$C_1(t) = C_1(0) e^{-iE_J t/\hbar} = C_1(0) e^{+i\mu B z T/\hbar}$$

и

$$C_2(t) = C_2(0) e^{-iE_J t/\hbar} = C_2(0) e^{-i\mu B z T/\hbar}.$$

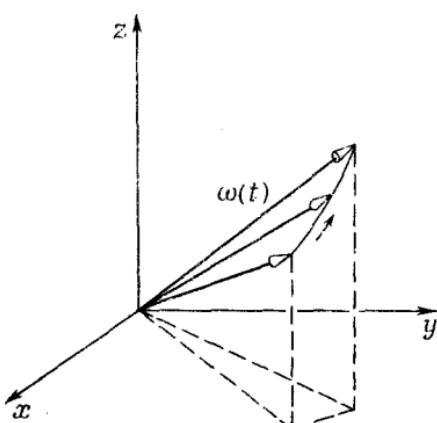
Мы сказали, что вначале у спина электрона было определенное направление. Это означает, что вначале C_1 и C_2 были двумя числами, определяемыми формулами (8.30). Переходя T секунд, новые C_1 и C_2 мы получим из прежних умножением соответственно на $e^{i\mu B z T/\hbar}$ и $e^{-i\mu B z T/\hbar}$. Что это будут за состояния? Узнать это легко, ведь это все равно, что изменить угол Φ , вычтя из него $2\mu B z T/\hbar$, и не трогать угол θ .

Это значит, что к концу интервала времени T состояние $|\psi\rangle$ будет представлять электрон, выстроенный в направлении, отличающимся от первоначального только *поворотом* вокруг оси z на угол $\Delta\phi = 2\mu B_z T / \hbar$. Раз этот угол пропорционален T , то можно говорить, что направление спина прецессирует вокруг оси z с угловой скоростью $2\mu B_z / \hbar$. Этот результат мы уже получали раньше несколько раз, но не так полно и строго. Теперь мы получили полное и точное квантовомеханическое описание прецессии атомных магнитов.

Любопытно, что математические идеи, которые мы только что применили к электрону, вращающемуся в магнитном поле, применимы и для *любой* системы с двумя состояниями. Это означает, что, проведя математическую *аналогию* с вращающимся электроном, можно при помощи чисто геометрических рассуждений решить *любую задачу* для двухуровневой системы. Сперва вы сдвигаете энергию так, чтобы $(H_{11} + H_{22})$ было равно нулю (так что $H_{11} = -H_{22}$). И тогда любая задача о такой системе *формально* совпадет с задачей об электроне в магнитном поле. Вам нужно будет только *отождествить* $-\mu B_z$ с H_{11} , а $-\mu(B_x - iB_y)$ с H_{12} . И неважно, какая физика там была первоначально — молекула ли аммиака или что другое, — вы можете перевести ее на язык соответствующей задачи об электроне. Стало быть, если мы в состоянии решить в *общем случае* задачу об электроне, мы уже решили *все* задачи о двух состояниях.

А общее решение для электронов у нас есть! Пусть вначале электрон обладает определенным состоянием, в котором спин направлен вверх по некоторому направлению, а магнитное поле \mathbf{B} — в какую-то другую сторону. Вращайте просто направление спина вокруг оси \mathbf{B} с *векторной* угловой скоростью $\omega(t)$, равной некоторой константе, умноженной на вектор \mathbf{B} (а именно $\omega = 2\mu B / \hbar$). Если \mathbf{B} меняется со временем, двигайте по-прежнему ось вращения так, чтобы она оставалась параллельной \mathbf{B} , и

Фиг. 8.11. Направление спина электрона в изменяющемся магнитном поле $\mathbf{B}(t)$ прецессирует с частотой $\omega(t)$ вокруг оси, параллельной \mathbf{B} .



изменяйте скорость вращения так, чтобы она все время была пропорциональна напряженности B (фиг. 8.11). Если все время этого делать, вы остановитесь на какой-то конечной ориентации спиновой оси, и амплитуды C_1 и C_2 получатся просто как ее проекции [при помощи (8.30)] на вашу систему координат.

Вы видите, что задача эта чисто геометрическая: надо замстить, где закончились все ваши вращения. Хотя сразу видно, что для этого требуется, но эту геометрическую задачу (отыскание окончательного итога вращений с переменным вектором угловой скорости) нелегко в общем случае решить явно. Во всяком случае, мы *в принципе* видим общее решение любой задачи для двух состояний. В следующей главе мы глубже исследуем математическую технику обращения с частицами спина $\frac{1}{2}$ и, следовательно, обращения с системами, обладающими двумя состояниями, в общем случае.

ЕЩЕ СИСТЕМЫ С ДВУМЯ СОСТОЯНИЯМИ

1. Спиновые матрицы Найли

2. Спиновые матрицы как операторы

3. Уравнение уравнений для двух состояний

4. Состояния поляризации фотонов

5. Центральный квантовон*

6. Обобщение на системы с N состояниями

7. Дополнительные главы: гл. 3) «Нормализация»

§ 1. Спиновые матрицы Найли

Продолжаем обсуждение свойств двухуровневых систем. В конце предыдущей главы мы говорили о частице со спином $1/2$ в магнитном поле. Мы описывали спиновое состояние, задавая амплитуду C_1 того, что z -компоненты спинового момента количества движения равна $+\hbar/2$, и амплитуду C_2 того, что она равна $-\hbar/2$. В предыдущих главах мы эти базисные состояния обозначали $|+\rangle$ и $|-\rangle$. Прибегнем опять к этим обозначениям, хотя, когда это будет удобнее, мы будем менять их на $|1\rangle$ и $|2\rangle$.

Мы видели в последней главе, что когда частица со спином $1/2$ и с магнитным моментом μ находится в магнитном поле $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$, то амплитуды C_+ ($= C_1$) и C_- ($= C_2$) связаны следующими дифференциальными уравнениями:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dC_+}{dt} &= -\mu [B_z C_+ + (B_x - iB_y) C_-], \\ i\hbar \frac{dC_-}{dt} &= -\mu [(B_x + iB_y) C_+ - B_z C_-]. \end{aligned} \quad (9.1)$$

Иначе говоря, матрица-гамильтониан H_{ij} имеет вид

$$\begin{aligned} H_{11} &= -\mu B_z, & H_{12} &= -\mu (B_x - iB_y) \\ H_{21} &= -\mu (B_x + iB_y), & H_{22} &= +\mu B_z, \end{aligned} \quad (9.2)$$

и, конечно, уравнения (9.1) совпадают с

$$i\hbar \frac{dC_i}{dt} = \sum_j H_{ij} C_j, \quad (9.3)$$

где i и j принимают значения $+$ и $-$ (или 1 и 2).

* Параграф 5 при первом чтении книги можно пропустить. Он сложнее, чем положено в таких курсах.

Эта система с двумя состояниями — спин электрона — настолько важна, что очень полезно было бы найти для ее описания способ поаккуратнее и поизящнее. Мы сейчас сделаем небольшое математическое отступление, чтобы показать вам, как обычно пишутся уравнения системы с двумя состояниями. Это делается так: во-первых, заметьте, что каждый член гамильтониана пропорционален μ и некоторой компоненте B ; поэтому (чисто формально) можно написать

$$H_{ij} = -\mu [\sigma_{ij}^x B_x + \sigma_{ij}^y B_y + \sigma_{ij}^z B_z]. \quad (9.4)$$

Здесь нет какой-либо новой физики; эти уравнения просто означают, что коэффициенты σ_{ij}^x , σ_{ij}^y и σ_{ij}^z — их всего $4 \times 3 = 12$ — могут быть представлены так, что (9.4) совпадет с (9.2).

Посмотрим, почему это так. Начнем с B_z . Раз B_z встречается только в H_{11} и H_{22} , то все будет в порядке, если взять

$$\begin{aligned}\sigma_{11}^z &= 1, & \sigma_{12}^z &= 0, \\ \sigma_{21}^z &= 0, & \sigma_{22}^z &= -1.\end{aligned}$$

Мы часто пишем матрицу H_{ij} в виде таблички такого рода:

$$H_{ij} = \begin{array}{c|cc} & & j \\ i \downarrow & \xrightarrow{\longrightarrow} & \\ \hline H_{11} & & H_{12} \\ H_{21} & & H_{22} \end{array}.$$

Для гамильтониана частицы со спином $1/2$ в магнитном поле B — это все равно что

$$H_{ij} = \begin{array}{c|cc} & & j \\ i \downarrow & \xrightarrow{\longrightarrow} & \\ \hline -\mu B_z & & -\mu (B_x - iB_y) \\ -\mu (B_x + iB_y) & & +\mu B_z \end{array}.$$

Точно так же и коэффициенты σ_{ij}^z можно записать в виде матрицы

$$\sigma_{ij}^z = \begin{array}{c|cc} & & j \\ i \downarrow & \xrightarrow{\longrightarrow} & \\ \hline 1 & & 0 \\ 0 & & -1 \end{array}. \quad (9.5)$$

Расписывая коэффициенты при B_x , получаем, что элементы матрицы σ_x должны иметь вид

$$\begin{aligned}\sigma_{11}^x &= 0, & \sigma_{12}^x &= 1, \\ \sigma_{21}^x &= 1, & \sigma_{22}^x &= 0.\end{aligned}$$

Или сокращенно:

$$\sigma_{ij}^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (9.6)$$

И наконец, глядя на B_y , получаем

$$\begin{aligned}\sigma_{x1}^y &= 0, & \sigma_{12}^y &= -i, \\ \sigma_{21}^y &= i, & \sigma_{22}^y &= 0,\end{aligned}$$

или

$$\sigma_{ij}^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (9.7)$$

Если так определить три матрицы сигма, то уравнения (9.1) и (9.4) совпадут. Чтобы оставить место для индексов i и j , мы отмечали, какая σ стоит при какой компоненте \mathbf{B} , поставив индексы x, y, z сверху. Обычно, однако, i и j отбрасывают (их легко себе и так вообразить), а индексы x, y и z ставят внизу. Тогда (9.4) записывается так:

$$H = -\mu [\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z]. \quad (9.8)$$

Матрицы сигма так важны (ими беспрерывно пользуются), что мы выписали их в табл. 9.1. (Тот, кто собирается работать в квантовой физике, обязан запомнить их.) Их еще называют *спиновыми матрицами Паули* — по имени физика, который их выдумал.

Таблица 9.1 • СПИНОВЫЕ МАТРИЦЫ ПАУЛИ

$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$
$1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

В таблицу мы включили еще одну матрицу 2×2 , которая бывает нужна тогда, когда мы хотим рассматривать систему, оба спиновых состояния которой имеют одинаковую энергию, или когда хотим перейти к другой нулевой энергии. В таких случаях к первому уравнению в (9.1) приходится добавлять $E_0 C_+$, а ко второму $E_0 C_-$. Это можно учесть, введя новое обозначение — единичную матрицу «1», или δ_{ij} :

$$1 = \delta_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (9.9)$$

и переписав (9.8) в виде

$$H_{ij} = E_0 \delta_{ij} - \mu (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z). \quad (9.10)$$

Обычно просто понимают без лишних оговорок, что любая константа наподобие E_0 автоматически умножается на единичную матрицу, и тогда пишут просто

$$H = E_0 - \mu (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y + \sigma_z B_z). \quad (9.11)$$

Одна из причин, отчего спиновые матрицы так полезны, — это что любая матрица 2×2 может быть выражена через них. Во всякой матрице стоят четыре числа, скажем

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}.$$

Ее всегда можно записать в виде линейной комбинации четырех матриц. Например,

$$M = a \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + c \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + d \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Это можно делать по-всякому, но, в частности, можно сказать, что M состоит из какого-то количества σ_x плюс какое-то количество σ_y и т. д., и написать

$$M = \alpha I + \beta \sigma_x + \gamma \sigma_y + \delta \sigma_z,$$

где «количества» α, β, γ и δ в общем случае могут быть комплексными числами.

Раз любая матрица 2×2 может быть выражена через единичную матрицу и матрицу сигма, то все, что может понадобиться для любой системы с двумя состояниями, у нас уже есть. Какой бы ни была система с двумя состояниями — молекула аммиака, краситель фуксии, что угодно, — гамильтоново уравнение может быть переписано в сигмах. Хотя в физическом случае электрона в магнитном поле сигмы кажутся имеющими геометрический смысл, но их можно считать и просто полезными матрицами, пригодными к употреблению во всякой системе с двумя состояниями.

Например, один из способов рассмотрения протона и нейтрона — это представлять их как одну и ту же частицу в любом из двух состояний. Мы говорим, что *нуклон* (протон или нейtron) есть система с двумя состояниями, в данном случае состояниями по отношению к электрическому заряду. Если рассматривать нуклон таким образом, то состояние $|1\rangle$ может представлять протон, а $|2\rangle$ — нейtron. Говорят, что у нуклона есть два состояния «изотопспина».

Поскольку мы будем применять матрицы сигма в качестве «арифметики» квантовой механики систем с двумя состояниями, то вскоре познакомимся с соглашениями матричной алгебры. Под «суммой» двух или большего числа матриц подразумевается как раз то, что имелось в виду в уравнении (9.4).

Вообще если мы «складываем» две матрицы A и B , то «сумма» C означает, что каждый ее элемент C_{ij} дается формулой

$$C_{ij} = A_{ij} + B_{ij}.$$

Каждый элемент C есть сумма элементов A и B , стоящих на тех же самых местах.

В гл. 3, § 6, мы уже сталкивались с представлением о матричном «произведении». Та же идея полезна и при обращении с матрицами сигма. В общем случае «произведение» двух матриц A и B (в этом именно порядке) определяется как матрица C с элементами

$$C_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj}. \quad (9.12)$$

Это — сумма произведений элементов, взятых попарно из i -й строчки A и k -го столбца B . Если матрицы расписаны в виде таблиц, как на фиг. 9.1, то можно указать удобную «систему» получения элементов матрицы-произведения. Скажем, вы вычисляете C_{23} . Вы двигаете левым указательным пальцем *по второй строчке* A , а правым — *вниз по третьему столбцу* B , перемножаете каждую пару чисел и складываете пары по мере движения. Мы попытались изобразить это на рисунке.

Для матриц 2×2 это выглядит особенно просто. Например, если σ_x умножается на σ_x , то получит

$$\sigma_x^2 = \sigma_x \cdot \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

т. е. просто единичная матрица. Или, для примера, подсчитаем еще

$$\sigma_x \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}.$$

Взглянув на табл. 9.1, вы видите, что это просто матрица σ_x , умноженная на i . (Вспомните, что умножение матрицы на число означает умножение каждого элемента матрицы на число.) Попарные произведения сигм очень важны и выглядят они довольно забавно, так что мы их выписали в табл. 9.2. Вы сами можете подсчитать их, как мы сделали это с σ_x^2 и $\sigma_x \sigma_y$.

С матрицами σ связан еще один очень интересный и важный момент. Можно, если угодно, представить себе, что три матрицы σ_x , σ_y и σ_z подобны трем компонентам вектора; его иногда называют «вектором сигма» и обозначают σ . Это на самом деле «матричный вектор», или «векторная матрица». Это три разные матрицы, связанные каждой со своей осью x , y или z . С их помощью гамильтониан системы можно записать в красивом

$$\begin{pmatrix}
A_{11} & A_{12} & A_{13} & A_{14} \\
A_{21} & \cdots & A_{23} & A_{24} \\
A_{31} & A_{32} & A_{33} & A_{34} \\
A_{41} & A_{42} & A_{43} & A_{44}
\end{pmatrix} \cdot
\begin{pmatrix}
B_{11} & B_{12} & B_{13} & B_{14} \\
B_{21} & B_{22} & B_{23} & B_{24} \\
B_{31} & B_{32} & B_{33} & B_{34} \\
B_{41} & B_{42} & B_{43} & B_{44}
\end{pmatrix} =
\begin{pmatrix}
C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} \\
C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} \\
C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} \\
C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44}
\end{pmatrix}$$

$$C_{ik} = \sum_j A_{ij} B_{jk}$$

Пример: $C_{23} = A_{21} B_{13} + A_{22} B_{23} + A_{23} B_{33} + A_{24} B_{43}$

Ф и з. 9.1. П р е м ножение д в у х матриц.

$\sigma_x^2 = 1$
$\sigma_y^2 = 1$
$\sigma_z^2 = 1$
$\sigma_x \sigma_y = -\sigma_y \sigma_x = i\sigma_z$
$\sigma_y \sigma_z = -\sigma_z \sigma_y = i\sigma_x$
$\sigma_z \sigma_x = -\sigma_x \sigma_z = i\sigma_y$

виде, пригодном для любой системы координат:

$$H = -\mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (9.13)$$

Хотя мы записали эти три матрицы в представлении, в котором понятия «вверх» и «вниз» относятся к направлению z (так что σ_z выглядит особенно просто), но можно представить себе, как будут они выглядеть в любом другом представлении. И хотя это требует немалых выкладок, можно все же показать, что они изменяются как компоненты вектора. (Мы, впрочем, пока не будем заботиться о том, чтобы доказать это. Проверьте сами, если хотите.) Вы можете пользоваться $\boldsymbol{\sigma}$ в различных системах координат, как если бы это был вектор.

Вы помните, что гамильтониан H связан в квантовой механике с энергией. Он действительно в точности совпадает с энергией в том простом случае, когда состояний только одно. Даже в системе с двумя состояниями, какой является спин электрона, если записать гамильтониан в виде (9.13), он очень напоминает *классическую* формулу энергии магнита с магнитным моментом μ в магнитном поле \mathbf{B} . Классически это выглядит так:

$$U = -\mu \cdot \mathbf{B}, \quad (9.14)$$

где μ — свойство объекта, а \mathbf{B} — внешнее поле. Можно вообразить себе, что (9.14) обращается в (9.13), если классическую энергию заменяют гамильтонианом, а классическое μ — матрицей $\mu \boldsymbol{\sigma}$. Тогда после такой чисто формальной замены результат можно будет интерпретировать как матричное уравнение. Иногда утверждают, что каждой величине в классической физике соответствует в квантовой механике матрица. На самом деле правильнее было бы говорить, что матрица Гамильтона соответствует энергии и что у каждой величины, которая может быть определена через энергию, есть соответствующая матрица.

Например, магнитный момент можно определить через энер-

тию, сказав, что энергия во внешнем поле \mathbf{B} есть $-\mu \cdot \mathbf{B}$. Это определяет вектор магнитного момента μ . Затем мы смотрим на формулу для гамильтониана реального (квантового) объекта в магнитном поле и пытаемся угадать, какие матрицы соответствуют тем или иным величинам в классической формуле. С помощью этого трюка иногда у некоторых классических величин появляются их квантовые двойники.

Если хотите, попробуйте разобраться в том, как, в каком смысле классический вектор равен матрице $\mu\sigma$; может быть, вы что-нибудь и откроете. Но не надо ломать над этим голову. Право же, не стоит: на самом деле они *не равны*. Квантовая механика — это совсем другой тип теории, другой тип представлений о мире. Иногда случается, что всплывают некоторые соответствия, но вряд ли они представляют собой нечто большее, нежели мнемонические средства — правила для запоминания.

Иначе говоря, вы запоминаете (9.14), когдаучите классическую физику; затем если вы запомнили соответствие $\mu \rightarrow \mu\sigma$, то у вас есть повод вспомнить (9.13). Разумеется, природа знает *квантовую* механику, классическая же является всего лишь приближением, значит, нет ничего загадочного в том, что из-за классической механики выглядывают там и сям тени квантовомеханических законов, представляющих на самом деле их подоплеку. Восстановить реальный объект по тени прямым путем никак невозможно, но тень помогает нам вспомнить, как выглядел объект. Уравнение (9.13) — это истина, а уравнение (9.14) — ее тень. Мы сперва учим классическую механику и поэтому нам хочется выводить из нее квантовые формулы, но раз и навсегда установленной схемы для этого нет. Приходится каждый раз возвращаться обратно к реальному миру и открывать правильные квантовомеханические уравнения. И когда они оказываются похожими на что-то классическое, мы радуемся.

Если эти предостережения покажутся вам надоедливыми, если, по-вашему, здесь изрекаются старые истины об отношении классической физики к квантовой, то прошу прощения: сработал условный рефлекс преподавателя, который привык втолковывать квантовую механику студентам, никогда прежде не слыхавшим о спиновых матрицах Паули. Мне всегда казалось, что они не теряют надежды, что квантовая механика как-то сможет быть выведена как логическое следствие классической механики, той самой, которую они старательно учили в прежние годы. (Может быть, они просто хотят обойтись без изучения чего-то нового.) Но, к счастью, вы выучили классическую формулу (9.14) всего несколько месяцев тому назад, да и то с оговорками, что она не совсем правильна, так что, может быть, вы не будете столь неохотно воспринимать необходимость рассматривать квантовую формулу (9.13) в качестве первичной истины.

§ 2. Спиновые матрицы как операторы

Раз уж мы занялись математическими обозначениями, то хотелось бы описать еще один способ записи, способ, часто употребляемый из-за своей краткости. Он прямо следует из обозначений, введенных в гл. 6. Если имеется система в состоянии $|\psi(t)\rangle$, изменяющемся во времени, то можно, как мы это делали в уравнении (6.31), написать амплитуду того, что система при $t+\Delta t$ оказалась бы в состоянии $|i\rangle$:

$$\langle i | \psi(t + \Delta t) \rangle = \sum_j \langle i | U(t, t + \Delta t) | j \rangle \langle j | \psi(t) \rangle.$$

Матричный элемент $\langle i | U(t, t + \Delta t) | j \rangle$ — это амплитуда того, что базисное состояние $|j\rangle$ превратится в базисное состояние $|i\rangle$ за время Δt . Затем мы определяли H_{ij} при помощи

$$\langle i | U(t, t + \Delta t) | j \rangle = \delta_{ij} - \frac{i}{\hbar} H_{ij}(t) \Delta t$$

и показывали, что амплитуды $C_i(t) = \langle i | \psi(t) \rangle$ связаны дифференциальными уравнениями

$$i\hbar \frac{dC_i}{dt} = \sum_j H_{ij} C_j. \quad (9.15)$$

Если амплитуды C_i записать явно, то это же уравнение будет выглядеть по-иному:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle i | \psi \rangle = \sum_j H_{ij} \langle j | \psi \rangle. \quad (9.16)$$

Далее, матричные элементы H_{ij} — это тоже амплитуды, которые можно записывать в виде $\langle i | H | j \rangle$; наше дифференциальное уравнение выглядит тогда так:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle i | \psi \rangle = \sum_j \langle i | H | j \rangle \langle j | \psi \rangle. \quad (9.17)$$

Мы видим, что $-i/\hbar \langle i | H | j \rangle$ — это амплитуда того, что в физических условиях, описываемых матрицей H , состояние $|j\rangle$ за время dt «генерирует» состояние $|i\rangle$. (Все это неявно подразумевалось в рассуждениях гл. 6, § 4.)

Теперь, следуя идеям гл. 6, § 2, мы можем сократить в (9.17) общий «множитель» $\langle i |$, поскольку (9.17) справедливо при любом $|i\rangle$, и записать это уравнение просто в виде

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \sum_j H |j\rangle \langle j | \psi \rangle. \quad (9.18)$$

Или, сделав еще один шаг, убрать к тому же и j и написать

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = H |\psi\rangle. \quad (9.19)$$

В гл. 6 мы указывали, что при такой записи H в $H |j\rangle$ или в $H |\psi\rangle$ называется *оператором*. Отныне на операторы мы будем надевать маленькие шапочки (^), чтобы напоминать вам, что это оператор, а не число. Мы будем писать $\hat{H} |\psi\rangle$. Хотя оба уравнения (9.18) и (9.19) означают *то же самое*, что и (9.15) или (9.17), мы можем думать о них совершенно иначе. Например, уравнение (9.18) можно было бы описывать так: «Производная по времени от *вектора состояния* $|\psi\rangle$ равняется тому, что получается от действия *оператора Гамильтона* \hat{H} на каждое базисное состояние, умноженному на амплитуду $\langle j | \psi \rangle$ того, что ψ окажется в состоянии j , и просуммированному по всем j ». Или уравнение (9.19) можно описать так: «Производная по времени (умноженная на $i\hbar$) от состояния $|\psi\rangle$ равняется тому, что вы получите, если подействуете гамильтонианом \hat{H} на вектор состояния $|\psi\rangle$ ». Это просто сокращенный способ выражения того, что содержится в (9.17), но, как вы потом убедитесь, он может оказаться очень удобным.

Если хотите, идею «абстрагирования» можно продвинуть еще на шаг. Уравнение (9.19) справедливо для *всякого состояния* $|\psi\rangle$. Кроме того, левая сторона $i\hbar d/dt$ — это тоже оператор; его действие: «продифференцируй по t и умножь на $i\hbar$ ». Итак, (9.19) можно рассматривать как уравнение между операторами — операторное уравнение

$$i\hbar \frac{d}{dt} = \hat{H}.$$

Оператор Гамильтона (с точностью до константы), действуя на любое состояние, приводит к тому же результату, что и d/dt . Помните, что это уравнение, как и (9.19), *не есть* утверждение о том, что оператор \hat{H} просто та же *операция*, что и d/dt . Эти уравнения — динамический закон природы (закон движения) для квантовой системы.

Только для того, чтобы попрактиковаться в этих представлениях, продемонстрируем вам другой вывод уравнения (9.18). Вы знаете, что любое состояние $|\psi\rangle$ можно записать через его проекции на какой-то базис [см. (6.8)]:

$$|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i | \psi \rangle. \quad (9.20)$$

Как же меняется $|\psi\rangle$ во времени? Продифференцируем его:

$$\frac{d}{dt} |\psi\rangle = \frac{d}{dt} \sum_i |i\rangle \langle i | \psi \rangle. \quad (9.21)$$

Но базисные состояния $|i\rangle$ во времени не меняются (по крайней мере у нас они всегда были определенными, закрепленными состояниями), и только амплитуды $\langle i|\psi\rangle$ — это числа, которые могут меняться. Иначе говоря, (9.21) превращается в

$$\frac{d}{dt}|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle \frac{d}{di} \langle i|\psi\rangle. \quad (9.22)$$

Но ведь $d\langle i|\psi\rangle/dt$ нам известно — это (9.16); получается, следовательно,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}|\psi\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \sum_i |i\rangle \sum_j H_{ij} \langle j|\psi\rangle = \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{ij} |i\rangle \langle i|H|j\rangle \langle j|\psi\rangle = -\frac{i}{\hbar} \sum_j H|j\rangle \langle j|\psi\rangle. \end{aligned}$$

А это опять-таки уравнение (9.18).

Итак, на гамильтониан можно смотреть по-разному. Можно рассматривать совокупность коэффициентов H_{ij} просто как компанию чисел, можно говорить об «амплитудах» $\langle i|H|j\rangle$, можно представлять себе «матрицу» H_{ij} и можно считать его «оператором» \hat{H} . Все это одно и то же.

Вернемся теперь к нашей системе с двумя состояниями. Если уж мы записываем гамильтониан через матрицы сигма (с подходящими численными множителями, такими, как B_x и т. д.), то естественно рассматривать и σ_{ij}^x как амплитуду $\langle i|\sigma_x|j\rangle$, или, для краткости, как оператор $\hat{\sigma}_x$. Если применить эту идею оператора, то уравнение движения состояния $|\psi\rangle$ в магнитном поле можно написать в виде

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = -\mu (B_x \hat{\sigma}_x + B_y \hat{\sigma}_y + B_z \hat{\sigma}_z) |\psi\rangle. \quad (9.23)$$

Желая «использовать» это уравнение, нам, естественно, приходится выражать $|\psi\rangle$ через базисные векторы (равносильно тому, что приходится находить компоненты пространственных векторов, когда задача доводится до числа). Так что обычно мы предпочитаем расписывать (9.23) в более раскрытом виде:

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle = -\mu \sum_i (B_x \sigma_x + B_y \hat{\sigma}_y + B_z \hat{\sigma}_z) |i\rangle \langle i|\psi\rangle. \quad (9.24)$$

Сейчас вы увидите, чем красива идея оператора. Чтобы применять уравнение (9.24), нужно знать, что будет, когда операторы $\hat{\sigma}$ действуют на каждое базисное состояние. Напишем $\hat{\sigma}_z|+\rangle$; это какой-то вектор $|\ ?\rangle$, но какой? Что ж, умножим его слева на $\langle +|$ и получим

$$\langle +|\hat{\sigma}_z|+\rangle = \sigma_{z11} = 1$$

(пользуясь табл. 9.1). Итак, мы знаем, что

$$\langle + | ? \rangle = 1. \quad (9.25)$$

Теперь умножим $\hat{\sigma}_z | + \rangle$ слева на $\langle - |$. Получится

$$\langle - | \hat{\sigma}_z | + \rangle = \sigma_{z21} = 0,$$

т. е.

$$\langle - | ? \rangle = 0. \quad (9.26)$$

Существует только один вектор состояния, удовлетворяющий и (9.25), и (9.26); это $| + \rangle$. Мы, стало быть, открыли, что

$$\hat{\sigma}_z | + \rangle = | + \rangle. \quad (9.27)$$

Такого рода рассуждениями можно легко показать, что все свойства матриц сигма могут быть в операторных обозначениях описаны рядом правил, приведенных в табл. 9.3.

Таблица 9.3 • СВОЙСТВА ОПЕРАТОРА $\hat{\sigma}$

$\hat{\sigma}_z + \rangle = + \rangle$
$\hat{\sigma}_z - \rangle = - - \rangle$
$\hat{\sigma}_x + \rangle = - \rangle$
$\hat{\sigma}_x - \rangle = - + \rangle$
$\hat{\sigma}_y + \rangle = i - \rangle$
$\hat{\sigma}_y - \rangle = - i + \rangle$

Если у нас есть произведения матриц сигма, то они переходят в произведения операторов. Когда два оператора стоят рядом в виде произведения, то сперва приступает к операции тот оператор, который стоит правее. Скажем, под $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y | + \rangle$ надо понимать $\hat{\sigma}_x (\hat{\sigma}_y | + \rangle)$. Из табл. 9.3 получаем $\hat{\sigma}_y | + \rangle = i | - \rangle$, так что

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y | + \rangle = \hat{\sigma}_x (i | - \rangle). \quad (9.28)$$

Числа (как, например, i) просто проходят сквозь операторы (операторы действуют только на векторы состояний); значит, (9.28) перейдет в

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y | + \rangle = i \hat{\sigma}_x | - \rangle = i | + \rangle.$$

Если сделать то же самое с $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y | - \rangle$, то получится

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y | - \rangle = - i | - \rangle.$$

Если взглянуть на табл. 9.3, то видно, что $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y$, действуя на $| + \rangle$ или $| - \rangle$, даст в точности то же, что получается, если

просто подействовать оператором $\hat{\sigma}_z$ и умножить на $-i$. Поэтому можно сказать, что операция $\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y$ совпадает с операцией $i\hat{\sigma}_z$, и записать это утверждение в виде операторного уравнения

$$\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_z. \quad (9.29)$$

Убедитесь, что это уравнение совпадает с одним из наших матричных уравнений табл. 9.2. Итак, мы опять видим соответствие между матричной и операторной точкой зрения. Каждое из уравнений в табл. 9.2 может поэтому рассматриваться и как уравнение относительно операторов сигма. Можно проверить, что они действительно следуют из табл. 9.3. Работая с этими вещами, лучше не следить за тем, являются ли величины типа σ или H операторами или матрицами. Чем их ни считай, уравнения выйдут одни и те же, так что табл. 9.2 можно при желании относить то к операторам сигма, то к матрицам сигма.

§ 3. Решение уравнений для двух состояний

Теперь можно писать наше уравнение двух состояний в различных видах, например:

$$i\hbar \frac{dC_i}{dt} = \sum_j H_{ij} C_j,$$

или вот так:

$$i\hbar \frac{d|\Psi\rangle}{dt} = \hat{H} |\Psi\rangle. \quad (9.30)$$

Оба они означают одно и то же. Для частицы со спином $1/2$ в магнитном поле гамильтониан H дается уравнением (9.8) или (9.13).

Если поле направлено по z , то, как мы уже много раз видели, решение заключается в том, что состояние $|\Psi\rangle$, каким бы оно было, прецессирует вокруг оси z (в точности, как если бы взять физическое тело и вращать его как целое вокруг оси z) с угловой скоростью, вдвое большей, чем $\mu B/\hbar$. Все это, конечно, относится и к магнитному полю, направленному под другим углом, ведь физика от системы координат не зависит. Если магнитное поле время от времени как-то сложно меняется, то такое положение вещей можно анализировать следующим образом. Пусть вначале спин был в направлении $+z$, а магнитное поле — в направлении x . Спин начал поворачиваться. Если выключить x -поле, поворот прекратится. Если теперь включить z -поле, спин начнет поворачиваться вокруг z и т. д. Значит, смотря по тому, как меняются поля во времени, вы можете представить себе, каким будет конечное состояние — по какой оси оно будет направлено. Затем можно отнести это состояние к первоначальным $|+\rangle$ и $|-\rangle$ по отношению к z , пользуясь проекционными формулами,

полученными в гл. 8 (или в гл. 4). Если в конечном состоянии спин направлен по (θ, φ) , то амплитуда того, что спин будет смотреть вверх, равна $\cos(\theta/2)e^{-i\varphi/2}$, а амплитуда того, что спин будет смотреть вниз, равна $\sin(\theta/2)e^{+i\varphi/2}$. Это решает любую задачу. Таково словесное описание решений дифференциальных уравнений.

Только что описанное решение достаточно общо для того, чтобы справиться с любой системой с двумя состояниями. Возьмем наш пример с молекулой аммиака, на которую действует электрическое поле. Если система описывается на языке состояний $|I\rangle$ и $|II\rangle$, то уравнения выглядят так:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dC_I}{dt} &= +AC_I + \mu\mathcal{E}C_{II}, \\ i\hbar \frac{dC_{II}}{dt} &= -AC_{II} + \mu\mathcal{E}C_I. \end{aligned} \quad (9.34)$$

Вы скажете: «Нет, там, я помню, стояло еще E_0 ». Неважно, мы просто сдвинули начало отсчета энергий, чтобы E_0 стало равно нулю. (Это всегда можно сделать, изменив обе амплитуды в одно и то же число раз — в $e^{iE_0T/\hbar}$; так можно избавиться от любой постоянной добавки к энергии.) Одинаковые уравнения обладают одинаковыми решениями, поэтому не стоит решать их вторично. Если взглянуть на эти уравнения и на (9.1), то их можно отождествить между собой следующим образом. Состояние $|+\rangle$ обозначим $|I\rangle$, состояние $|-\rangle$ обозначим $|II\rangle$. Это *вовсе не значит*, что мы выстраиваем аммиак в пространстве в одну линию или что $|+\rangle$ и $|-\rangle$ как-то связаны с осью z . Это все делается чисто искусственно. Имеется искусственное пространство, которое можно было бы назвать, например, «модельным пространством молекулы аммиака» или еще как-нибудь иначе. Это просто трехмерная «диаграмма», и направление «вверх» означает пребывание молекулы в состоянии $|I\rangle$, а направление «вниз» по фальшивой оси z означает пребывание молекулы в состоянии $|II\rangle$. Тогда уравнения отождествляются следующим образом.

Прежде всего вы видите, что гамильтониан может быть записан через матрицы сигма:

$$H = +A\sigma_z + \mu\mathcal{E}\sigma_x. \quad (9.32)$$

Если сравнить это с (9.1), то μB_z будет соответствовать $-A$, а μB_x будет соответствовать $-\mu\mathcal{E}$. В нашем «модельном» пространстве возникает, стало быть, постоянное поле \mathbf{B} , направленное по оси z . Если есть, кроме этого, электрическое поле \mathcal{E} , меняющееся со временем, то у поля \mathbf{B} появится и пропорционально меняющаяся x -компоненты. Таким образом, *поведение электрона в магнитном поле с постоянной составляющей в направлении z и колеблющейся составляющей в направлении x*

математически во всем подобно и точно соответствует поведению молекулы аммиака в осциллирующем электрическом поле. К сожалению, у нас нет времени входить глубже в детали этого соответствия или разбираясь в каких-либо технических деталях. Мы только хотели подчеркнуть, что можно сделать так, чтобы все системы с двумя состояниями были аналогичны объекту со спином $\frac{1}{2}$, прецессирующему в магнитном поле.

§ 4. Состояния поляризации фотона

Есть множество других интересных для изучения систем с двумя состояниями, и первая, о которой мы бы хотели поговорить,—это фотон. Чтобы описать фотон, нужно сначала задать вектор его импульса. У свободного фотона импульс определяет и частоту, так что указывать особо частоту не придется. Но еще остается одно свойство, именуемое поляризацией. Представьте себе фотон, приходящий к вам с определенной монохроматической частотой (которую во всем нашем обсуждении мы будем считать постоянной, так что можно не говорить о множестве состояний импульса). Тогда существуют два направления поляризации. По классической теории свет обладает, например, либо горизонтально колеблющимся электрическим полем, либо вертикально колеблющимся электрическим полем; этот свет двух сортов называют x -поляризованным и y -поляризованным светом. У света может быть и какое-то иное направление поляризации, его можно создать суперпозицией полей в направлении x и в направлении y . Или, взяв x - и y -компоненты со сдвигом фаз в 90° , получить вращающееся электрическое поле — свет будет поляризован эллиптически. [Это краткое напоминание классической теории поляризованного света, которую мы изучали в гл. 33 (вып. 3).]

Пусть теперь у нас есть *одиночный* фотон, всего один. Уже нет электрического поля, которое можно было бы рассматривать прежним способом. *Один-единственный* фотон и ничего больше. Но он тоже должен обладать аналогом классического явления поляризации. Значит, должны существовать по крайней мере два разных сорта фотонов. Сперва могло бы показаться, что их должно быть бесконечное множество, ведь, как бы то ни было, электрический вектор может быть направлен в любую сторону. Однако поляризацию фотона можно описать как систему с двумя состояниями. Фотон может быть либо в состоянии $|x\rangle$, либо в состоянии $|y\rangle$. Под $|x\rangle$ подразумевается состояние поляризации каждого из фотонов в пучке света, который *классически* x -поляризован. А $|y\rangle$ означает состояние поляризации каждого из фотонов в y -поляризованном пучке. Эти $|x\rangle$ и $|y\rangle$ вы можете выбрать в качестве базисных состояний фотона с данным направленным на вас импульсом—импульсом в направлении z .

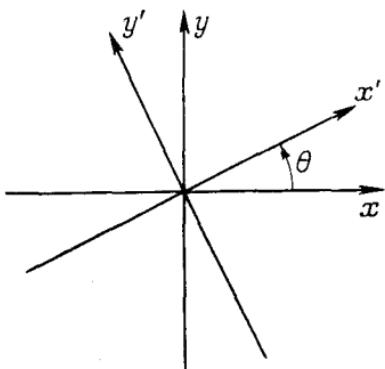
Итак, существуют два базисных состояния $|x\rangle$ и $|y\rangle$, и их вполне хватает, чтобы описать всякий фотон.

К примеру, если у нас есть поляроид, ось которого расположена так, чтобы пропускать свет, поляризованный в направлении, которое мы называем направлением x , и если мы направили туда фотон, который, как нам известно, находится в состоянии $|y\rangle$, то он поглотится поляроидом. Если послать туда фотон, который, как нам известно, находится в состоянии $|x\rangle$, он и выйдет в состоянии $|x\rangle$. Когда мы берем кусок кальцита (исландского шпата), который расщепляет пучок поляризованного света на $|x\rangle$ -пучок и $|y\rangle$ -пучок, то этот кусок кальцита полностью аналогичен прибору Штерна — Герлаха, расщепляющему пучок атомов серебра на два состояния $|+\rangle$ и $|-\rangle$. Значит, все, что мы раньше делали с частицами и приборами Штерна — Герлаха, можно повторить со светом и кусками поляроида. А что можно сказать о свете, который отфильтрован куском поляроида, повернутым на угол θ ? Другое ли это состояние? Да, действительно, это *другое* состояние. Обозначим ось поляроида x' , чтобы отличать ее от осей наших базисных состояний (фиг. 9.2). Выходящий наружу фотон будет в состоянии $|x'\rangle$. Но всякое состояние может быть представлено в виде линейной комбинации базисных состояний, а формула для такой комбинации известна:

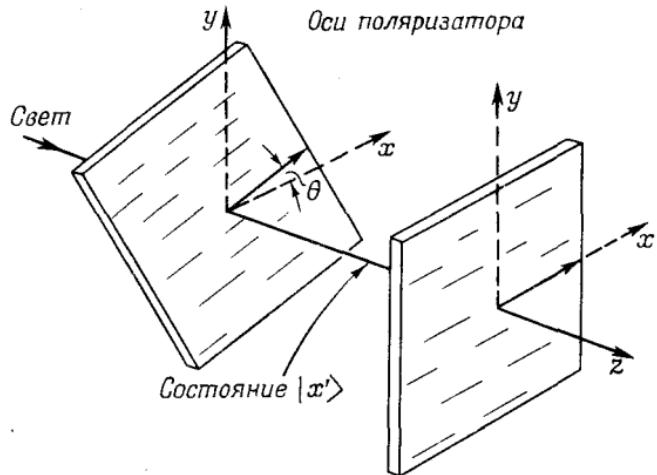
$$|x'\rangle = \cos \theta |x\rangle + \sin \theta |y\rangle. \quad (9.33)$$

Иначе говоря, если фотон пройдет сквозь кусок поляроида, повернутого на угол θ (по отношению к x), он все равно может быть разрешен на $|x\rangle$ - и $|y\rangle$ -пучки (например, куском кальцита). Или, если угодно, вы можете в своем воображении просто разбить его на x - и y -компоненты. Любым путем вы получите амплитуду $\cos \theta$ быть в $|x\rangle$ -состоянии и амплитуду $\sin \theta$ быть в $|y\rangle$ -состоянии.

Теперь поставим такой вопрос: пусть фотон поляризован в направлении x' куском поляроида, повернутого на угол θ ,



Фиг. 9.2. Оси координат, перпендикулярные к вектору импульса фотона.



Фиг. 9.3. Две поляроидные пластины с углом θ между плоскостями поляризации.

и пусть он попадет в другой поляроид, повернутый на угол нуль (фиг. 9.3). Что тогда произойдет? С какой вероятностью он пройдет сквозь поляроид? Ответ: Пройдя первый поляроид, фотон наверняка оказывается в состоянии $|x'\rangle$. Через второй поляроид он пропадет лишь в том случае, если будет в состоянии $|x\rangle$ (и поглотится им, оказавшись в состоянии $|y\rangle$). Значит, мы спрашиваем, с какой вероятностью фотон окажется в состоянии $|x\rangle$? Эту вероятность мы получим из квадрата модуля амплитуды $\langle x | x' \rangle$, амплитуды того, что фотон в состоянии $|x'\rangle$ находится также и в состоянии $|x\rangle$. Чему равно $\langle x | x' \rangle$? Умножив (9.33) на $\langle x |$, получим

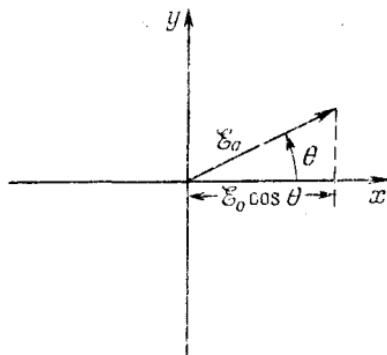
$$\langle x | x' \rangle = \cos \theta \langle x | x \rangle + \sin \theta \langle x | y \rangle.$$

Но $\langle x | y \rangle = 0$; это следует из физики, так должно быть, если $|x\rangle$ и $|y\rangle$ суть базисные состояния, а $\langle x | x \rangle = 1$. И мы получаем

$$\langle x | x' \rangle = \cos \theta,$$

а вероятность равна $\cos^2 \theta$. Например, если первый поляроид поставлен под углом 30° , то $3/4$ времени фотон будет проходить через него, а $1/4$ времени будет нагревать поляроид, поглощаясь внутри него.

Посмотрим теперь, что в такой же ситуации происходит с точки зрения классической физики. Там мы имели бы пучок света, электрическое поле которого меняется тем или иным образом,— скажем «неполяризованный» пучок. После того как он прошел бы через первый поляроид, электрическое поле величины \mathcal{E} начало бы колебаться в направлении x' ; мы бы начертили его в виде колеблющегося вектора с пиковым значением \mathcal{E}_0 на



Фиг. 9.4. Классическая картина электрического вектора \mathcal{E} .

диаграмме фиг. 9.4. Если бы затем свет достиг второго поляроида, то через него прошла бы только x -компоненты $E_0 \cos \theta$ электрического поля. Интенсивность была бы пропорциональна квадрату поля, т. е. $E_0^2 \cos^2 \theta$. Значит, проходящая сквозь последний поляроид энергия была бы в $\cos^2 \theta$ слабее энергии, поступающей в него.

И классическая, и квантовая картины приводят к одинаковым результатам. Если бы вы бросили на второй поляроид 10 миллиардов фотонов, а средняя вероятность прохождения каждого из них была бы, скажем, $3/4$, то следовало бы ожидать, что сквозь него пройдет $3/4$ от 10 миллиардов. Равным образом и энергия, которую они унесли бы, составила бы $3/4$ той энергии, которую вам хотелось протолкнуть через поляроид. Классическая теория ничего не говорит о статистике этих вещей, она попросту утверждает, что энергия, которая пройдет сквозь, в точности равна $3/4$ той энергии, которая была пущена в поляроид. Это, конечно, немыслимо, если фотон только один. Не бывает $3/4$ фотона. Либо он *весь* здесь, либо его вовсе нет. И квантовая механика говорит нам, что он бывает *весь здесь* $3/4$ времени. Связь обеих теорий ясна.

А как же с другими сортами поляризации? Скажем, с правой круговой поляризацией? В классической теории компоненты x и y правой круговой поляризации были равны, но сдвинуты по фазе на 90° . В квантовой теории фотон, поляризованный по кругу вправо («правый»), обладает равными амплитудами быть $|x\rangle$ - и $|y\rangle$ -поляризованным, и эти амплитуды сдвинуты по фазе на 90° . Обозначая состояние «правого» фотона через $|\Pi\rangle$, а состояние «левого» фотона через $|\Lambda\rangle$, можно написать [см. гл. 33, § 1 (вып. 3)]

$$|\Pi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle + i|y\rangle),$$

$$|\Lambda\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle - i|y\rangle); \quad (9.34)$$

множитель $1/\sqrt{2}$ поставлен, чтобы нормировать состояния. С помощью этих состояний можно подсчитывать любые эффекты, связанные с фильтрами или интерференцией, применяя законы квантовой теории. При желании можно также выбрать в качестве базисных состояний $|\Pi\rangle$ и $|\Lambda\rangle$ и все представлять через них. Надо только предварительно убедиться, что $\langle\Pi|\Lambda\rangle=0$, а это можно сделать, взяв сопряженный вид первого уравнения [см. (6.13)] и перемножив их друг с другом. Можно раскладывать свет, пользуясь в качестве базиса и x -, и y -поляризациями, и x' -, и y' -поляризациями, а можно — и правой, и левой поляризациями.

Попробуйте (просто для упражнения) обратить наши формулы. Можно ли представить состояние $|x\rangle$ в виде линейной комбинации правого и левого? Да, вот ответ:

$$|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Pi\rangle + |\Lambda\rangle), \quad (9.35)$$

$$|y\rangle = -\frac{i}{\sqrt{2}} (|\Pi\rangle - |\Lambda\rangle).$$

Доказательство: сложите и вычтите два уравнения в (9.34). От одного базиса к другому очень легко переходить.

Впрочем, одно замечание надо бы сделать. Если фотон поляризован по правому кругу, он не имеет никакого касательства к осям x и y . Если бы мы взглянули на него из системы координат, повернутой вокруг направления полета на какой-то угол, то свет по-прежнему был бы поляризован по кругу; то же с левой поляризацией. Право- и левополяризованный по кругу свет при любом таком повороте одинаков; определение не зависит от выбора направления x (если не считать того, что направление фотона задано). Великолепно, не так ли? Для определения не нужны никакие оси. Куда лучше, чем x и y ! Но, с другой стороны, не чудо ли, что, складывая левое и правое, вы в состоянии узнать, где было направление x ? Если «правое» и «левое» никак не зависят от x , как же получается, что мы можем сложить их и вновь получить x ? На этот вопрос можно частью ответить, расписав состояние $|\Pi'\rangle$, представляющее фотон, право-поляризованный в системе координат x' , y' . В этой системе мы бы написали

$$|\Pi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x'\rangle + i|y'\rangle).$$

Как же будет выглядеть такое состояние в системе x , y ? Подставим $|x'\rangle$ из (9.33) и соответствующее $|y'\rangle$; мы его не выписывали,

но оно равно $(-\sin \theta) |x\rangle + (\cos \theta) |y\rangle$. Тогда

$$\begin{aligned} |\Pi'\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\cos \theta |x\rangle + \sin \theta |y\rangle - i \sin \theta |x\rangle + i \cos \theta |y\rangle] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} [(\cos \theta - i \sin \theta) |x\rangle + i (\cos \theta + i \sin \theta) |y\rangle] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|x\rangle + i |y\rangle) (\cos \theta - i \sin \theta). \end{aligned}$$

Первый множитель — это просто $|\Pi\rangle$, а второй $e^{-i\theta}$; итог таков:

$$|\Pi'\rangle = e^{-i\theta} |\Pi\rangle. \quad (9.36)$$

Состояния $|\Pi'\rangle$ и $|\Pi\rangle$ отличаются только фазовым множителем $e^{-i\theta}$. Если подсчитать такую же вещь для $|\Lambda'\rangle$, мы получим *

$$|\Lambda'\rangle = e^{+i\theta} |\Lambda\rangle. \quad (9.37)$$

Теперь мы видим, что происходит. Сложив $|\Pi\rangle$ и $|\Lambda\rangle$, мы получаем нечто отличное от того, что получилось бы при сложении $|\Pi'\rangle$ и $|\Lambda'\rangle$. Скажем, x -поляризованный фотон есть [см. (9.35)] сумма $|\Pi\rangle$ и $|\Lambda\rangle$, но y -поляризованный фотон — это сумма со сдвигом фазы первого на 90° назад, а второго — на 90° вперед. Это просто то же самое, что получилось бы из суммы $|\Pi'\rangle$ и $|\Lambda'\rangle$ при определенном выборе угла $\theta=90^\circ$, и это правильно. В *штрихованной* системе x -поляризация — это то же самое, что y -поляризация в первоначальной системе. Значит, не совсем верно, что поляризованный по кругу фотон выглядит в любой системе осей одинаково. Его *фаза* (фазовое соотношение между право- и левополяризованными по кругу состояниями) запоминает направление x .

§ 5. Нейтральный К-мезон **

Теперь мы расскажем о двухуровневой системе из мира странных частиц — о системе, для которой квантовая механика

* Это похоже на то, что мы обнаружили (в гл. 4) для частиц со спином $1/2$, когда поворачивали систему координат вокруг оси z ; тогда мы получили фазовые множители $\exp(\pm i\varphi/2)$. В действительности это в точности то же самое, что мы писали в гл. 3, § 7, для состояний $|+\rangle$ и $|-\rangle$ частицы со спином 1, и это не случайно. Фотон — это частица со спином 1, у которой, однако, нет «нуль»-состояния.

** Мы сознаем, что материал этого параграфа длиннее и труднее, чем это положено на нашем уровне знаний. Лучше пропустите его и переходите прямо к § 6. Но если у вас есть самолюбие и время, попозже вернитесь к нему опять. Это великолепнейший пример (взятый к тому же из последних работ по физике высоких энергий) того, что можно сотворить с помощью нашей формулировки квантовой механики двухуровневых систем. (Для русского издания параграф переделан проф. Сэндсом. — Прим. ред.)

приводит к поразительнейшим предсказаниям. Полное описание этой системы потребовало бы от нас таких знаний о странных частицах, каких у нас пока нет, поэтому, к сожалению, кое-какие углы нам придется срезать. Мы лишь вкратце успеем изложить историю того, как было сделано одно открытие, чтобы показать вам, какого типа рассуждения для этого потребовались. Началось это с открытия Гелл-Манном и Нишиджимой понятия *странности* и нового закона *сохранения странности*. И вот когда Гелл-Манн и Пайс проанализировали следствия из этих новых представлений, то они пришли к предсказанию замечательнейшего явления, о котором мы и хотим повести речь. Сперва, однако, нужно немного рассказать о «странности».

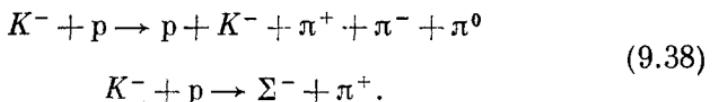
Начать нужно с того, что называется *сильными взаимодействиями ядерных частиц*. Существуют взаимодействия, которые ответственны за мощные ядерные силы, в отличие, например, от относительно более слабых электромагнитных взаимодействий. Взаимодействия «сильны» в том смысле, что если две частицы сойдутся так близко, чтобы быть способными взаимодействовать, то взаимодействуют они очень мощно и создают другие частицы очень легко. Ядерные частицы обладают еще так называемым «слабым взаимодействием», в результате которого происходят такие вещи, как бета-распад; но они всегда происходят очень медленно (по ядерным масштабам времени): слабые взаимодействия на много-много порядков величины слабее, чем сильные, и даже слабее, чем электромагнитные.

Когда при помощи больших ускорителей начали изучать сильные взаимодействия, все были поражены, увидев, что некоторые вещи, которые «должны были» произойти (ожидалось, что они произойдут), на самом деле не возникали. К примеру, в некоторых взаимодействиях не появлялась частица определенного сорта, хотя ожидалось, что она появится. Гелл-Манн и Нишиджима заметили, что многие из этих странных случаев можно было объяснить одним махом, изобретя новый закон сохранения: *сохранение странности*. Они предположили, что существует свойство нового типа, связываемое с каждой частицей,— число, названное ими «странностью»,— и что во всяком сильном взаимодействии «количество странности» сохраняется.

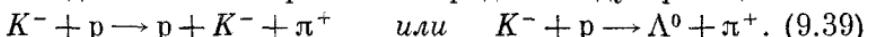
Предположим, например, что отрицательный K -мезон высокой энергии, скажем с энергией во много Гэв, сталкивается с протоном. Из их взаимодействия могут произойти много других частиц: π -мезонов, K -мезонов, Λ -частиц, Σ -частиц,— любые из мезонов или барионов, перечисленных в табл. 2.2 (вып. 1). Оказалось, однако, что возникали только *определенные комбинации*, а другие — никогда.

Про некоторые законы сохранения было известно, что они обязаны соблюдаться. Во-первых, всегда сохранялись энергия и импульс. Полная энергия и импульс после события должны

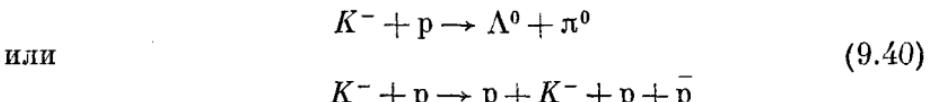
быть такими же, как и перед событием. Во-вторых, существует закон сохранения электрического заряда, утверждающий, что полный заряд выходящих частиц обязан равняться полному заряду, внесенному начальными частицами. В нашем примере столкновения K -мезона и протона действительно *происходят* такие реакции:



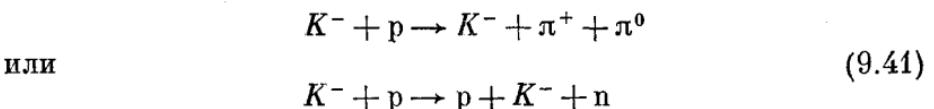
И никогда из-за несохранения заряда не идут реакции



Было также известно, что *количество барионов* сохраняется. Количество *выходящих* барионов должно быть равно количеству *входящих*. В этом законе *античастица* бариона считается за *минус* один барион. Это значит, что мы можем видеть — и видим — реакции

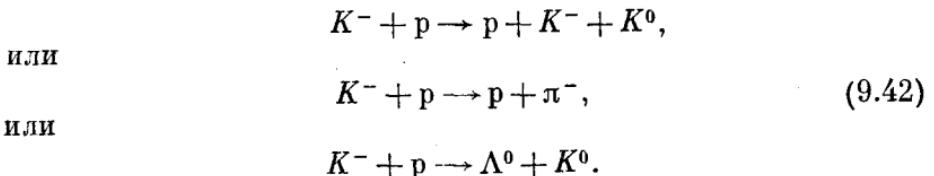


(где \bar{p} — это антипротон, несущий отрицательный заряд). Но мы никогда не увидим



(даже если энергия очень-очень большая), потому что число барионов здесь не сохранялось бы.

Эти законы, однако, не объясняют того странного факта, что нижеследующие реакции, которые с виду не особенно отличаются от кое-каких приведенных в (9.38) или (9.40), тоже никогда не наблюдались:



Объяснением служит сохранение странности. За каждой частицей следует число — ее *страница* S , и имеется закон, что в любом *сильном* взаимодействии полная странность *на выходе* должна равняться полной странности *на входе*. Протон и антипротон (p, \bar{p}), нейtron и антинейtron (n, \bar{n}) и π -мезоны (π^+, π^0, π^-) — все имеют странность *нуль*; у K^+ - и K^0 -мезонов стран-

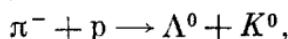
нность равна +1; у K^- и \bar{K}^0 (анти- K^0) *, у Λ^0 - и Σ -частиц (Σ^+ , Σ^0 , Σ^-) странность равна -1. Существует также частица со странностью -2 (Ξ -частица), а может быть, и другие, пока неизвестные. Перечень этих странностей приведен в табл. 9.4**.

Таблица 9.4 • СТРАННОСТИ СИЛЬНО ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЧАСТИЦ

	-2	-1	0	+1
Барионы	Ξ^0 Ξ^-	Λ^0 , Σ^0 Σ^-	Σ^+ р н	p
Мезоны		\bar{K}^0 K^-	π^+ π^0 π^-	K^+ K^0

Посмотрим, как действует сохранение странности в некоторых написанных реакциях. Если мы исходим из K^- и протона, то их суммарная странность равна $(-1) + 0 = -1$. Сохранение странности утверждает, что странности *продуктов* реакции после сложения тоже должны дать -1. Вы видите, что в реакциях (9.38) и (9.40) это действительно так. Но в реакциях (9.42) странность справа во всех случаях есть нуль. В них странность не сохраняется, и они не происходят. Почему? Это никому не известно. Никому не известно что-либо сверх того, что мы только что рассказали. Просто природа так действует — и все.

Давайте теперь взглянем на такую реакцию: π^- попадает в протон. Вы можете, например, получить Λ^0 -частицу плюс нейтральный K -мезон — две нейтральные частицы. Какой же из нейтральных K -мезонов вы получите? Раз у Λ -частицы странность -1, а у π^- и р+ странность нуль и поскольку перед нами быстрая реакция рождения, то странность измениться не должна. Вот K -частица и должна обладать странностью +1, — и быть поэтому K^0 . Реакция имеет вид



причем

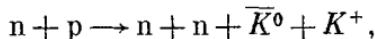
$$S = 0 + 0 = (-1) + (+1) \text{ (сохраняется).}$$

Если бы здесь вместо K^0 стояло \bar{K}^0 , то странность справа была бы -2, чего природа не позволяет, ведь слева странность нуль.

* Читайте: « K -нуль с чертой».

** Среди новых частиц есть барийон Ω^- со странностью -3. — Прим. ред.

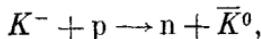
С другой стороны, \bar{K}^0 может возникать в других реакциях:



где

$$S = 0 + 0 = 0 + 0 + (+1) + (-1),$$

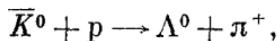
или



где

$$S = (-1) + 0 = 0 + (-1).$$

Вы можете подумать: «Не слишком ли много разговоров. Как узнать, \bar{K}^0 это или K^0 ? Выглядят-то они одинаково. Они античастицы друг друга, значит, массы их одинаковы, заряды у обеих равны нулю. Как вы их различите?» По реакциям, которые они вызывают. Например, \bar{K}^0 -мезон может взаимодействовать с веществом, создавая Λ -частицу, скажем, так:



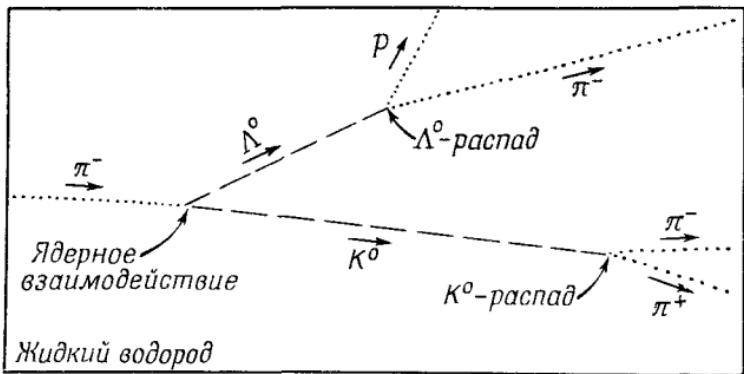
а K^0 -мезон не может. У K^0 нет способа создать Λ -частицу, взаимодействуя с обычным веществом (протонами и нейтронами) *. Значит, экспериментальное отличие между K^0 - и \bar{K}^0 -мезонами состояло бы в том, что один из них создает Λ -частицу, а другой — нет.

Одно из предсказаний теории странности тогда заключалось бы в следующем: если в опыте с пионами высокой энергии Λ -частица возникает вместе с нейтральным K -мезоном, тогда этот нейтральный K -мезон, попадая в другие массивы вещества, никогда не создаст Λ -частицы. Опыт мог бы протекать таким образом. Вы посыпаете пучок π^- -мезонов в большую водородную пузырьковую камеру. След π^- исчезает, но где-то в стороне появляется пара следов (протона и π^- -мезона), указывающая на то, что распалась Λ -частица ** (фиг. 9.5). Тогда вы знаете, что где-то есть K^0 -мезон, который вам не виден.

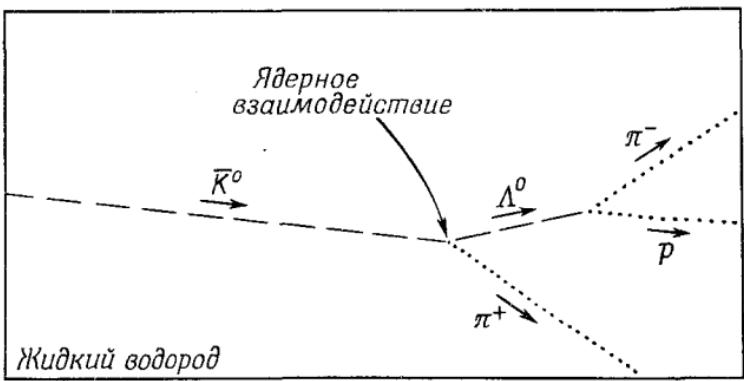
Но вы можете представить, куда он направился, применяя сохранение импульса и энергии. (Он затем иногда раскрывает свое местоположение, распадаясь на пару заряженных частиц, как показано на фиг. 9.5, a.) Когда K^0 -мезон летит в веществе, он может провзаимодействовать с одним из ядер водорода (протонов), создав при этом, быть может, еще какие-то частицы.

* Если, конечно, он не создает еще двух K^+ или других частиц с общей странностью +2. Можно считать, что здесь речь идет о реакциях, в которых не хватает энергии для возникновения этих добавочных странных частиц.

** Свободная Λ -частица медленно распадается путем слабого взаимодействия (так что странность не обязана при этом сохраняться). Продуктами распада могут быть либо p и π^- , либо n и π^0 . Время жизни $2,2 \cdot 10^{-10}$ сек.



а

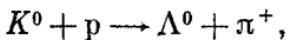


б

Фиг. 9.5. Высокоэнергетические события, наблюдаемые в водородной пузырьковой камере.

а — π^- -мезон взаимодействует с ядром водорода (протоном), образуя Λ^0 -частицу и K^0 -мезон; обе частицы распадаются в камере; *б* — \bar{K}^0 -мезон взаимодействует с протоном, образуя π^- -мезон и Λ^0 -частицу, которая затем распадается. (Нейтральные частицы не оставляют следа. Предполагаемые их траектории показаны здесь штрихованными линиями.)

Предсказание теории странности состоит в том, что K^0 -мезон никогда не породит Λ -частицу в простой реакции, скажем, такого типа

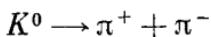


хотя \bar{K}^0 -мезон это может сделать. Иначе говоря, в пузырьковой камере \bar{K}^0 -мезон мог бы вызвать событие, показанное на фиг. 9.5, б, где Λ^0 -частицу из-за распада можно заметить, а K^0 -мезон не смог бы. Это первая часть рассказа. Это и есть сохранение странности.

Странность, впрочем, сохраняется *не совсем*. Существуют очень медленные распады странных частиц — распады, происходящие за большое время — порядка 10^{-10} сек*, в которых стран-

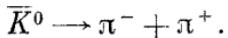
* Типичное время для сильного взаимодействия ближе к 10^{-23} сек.

ность не сохраняется. Их называют «слабые» распады. Например, K^0 -мезон распадается на пару π -мезонов (+ и -) со временем жизни 10^{-10} сек. Именно так на самом деле впервые были замечены K -частицы. Обратите внимание, что распадная реакция



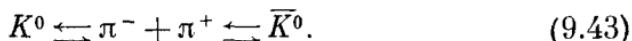
не сохраняет странности, так что «быстро», путем сильного взаимодействия, она идти не может. Может она идти только через слабый распадный процесс.

Далее, \bar{K}^0 -мезон также распадается *таким же путем* (на π^+ и π^-) и тоже с таким же самым временем жизни:



Здесь опять идет слабый распад, потому что он не сохраняет странности. Существует принцип, по которому для всякой реакции всегда найдется соответствующая реакция, в которой «материя» заменяется «антиматерией» и наоборот. Раз \bar{K}^0 — это античастица K^0 , она обязана распадаться на античастицы π^+ и π^- , но античастица π^+ есть π^- . (Или, если вам угодно, наоборот. Оказывается, что для π -мезонов неважно, кого из них назовут «материей», их эта материя совсем не интересует.) Итак, как следствие слабых распадов K^0 - и \bar{K}^0 -мезоны могут превращаться в одинаковые конечные продукты. Если «видеть» их по их распадам (как в пузырьковой камере), то выглядят они, как совершенно одинаковые частицы. Отличаются только их сильные взаимодействия.

Теперь наконец-то мы доросли до того, чтобы описать работу Гелл-Манна и Пайса. Во-первых, они отметили, что раз K^0 и \bar{K}^0 оба могут превращаться в два π -мезонов, то должна также существовать некоторая амплитуда того, что K^0 может превратиться в \bar{K}^0 , и такая же амплитуда того, что \bar{K}^0 превратится в K^0 . Реакцию можно записать так, как это делают химики:



Из существования таких реакций следует, что есть амплитуда, которую мы обозначим через $-i/\hbar \langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle$, превращения K^0 в \bar{K}^0 , обусловленная тем самым слабым взаимодействием, с которым связан распад на два π -мезона. Ясно, что есть и амплитуда обратного процесса $\langle K^0 | W | \bar{K}^0 \rangle$. Так как материя и антиматерия ведут себя одинаково, то эти две амплитуды численно равны между собой; мы обозначим их через A :

$$\langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle = \langle K^0 | W | \bar{K}^0 \rangle = A. \quad (9.44)$$

И вот, сказали Гелл-Манн и Пайс, здесь возникает интересная ситуация. То, что люди назвали двумя разными состояниями мира (K^0 и \bar{K}^0), на самом деле следует рассматривать как *одну систему* с двумя состояниями, потому что имеется амплитуда перехода из одного состояния в другое. Для полноты рассуждений следовало бы, конечно, рассмотреть не два состояния, а больше, потому что существуют еще состояния 2π и т. д.; но поскольку наши физики интересовались главным образом связью K^0 с \bar{K}^0 , то они не захотели усложнять положения и представили его приближенно в виде системы с двумя состояниями. Другие состояния были учтены в той мере, в какой их влияние неявно скажется на амплитудах (9.44).

В соответствии с этим Гелл-Манн и Пайс анализировали нейтральную частицу как систему с двумя состояниями. Начали они с того, что выбрали состояния $|K^0\rangle$ и $|\bar{K}^0\rangle$ за базисные состояния. (С этого места весь рассказ становится очень похожим на то, что было для молекулы аммиака.) Всякое состояние $|\psi\rangle$ нейтрального K -мезона можно тогда описать, задав амплитуды того, что оно окажется в одном из базисных состояний. Обозначим эти амплитуды

$$C_+ = \langle K^0 | \psi \rangle \quad \text{и} \quad C_- = \langle \bar{K}^0 | \psi \rangle. \quad (9.45)$$

Следующим шагом мы должны написать уравнение Гамильтона для такой системы с двумя состояниями. Если бы K^0 и \bar{K}^0 не были бы связаны между собой, то уравнения выглядели бы просто

$$i\hbar \frac{dC_+}{dt} = E_0 C_+; \quad i\hbar \frac{dC_-}{dt} = E_0 C_-. \quad (9.46)$$

Однако есть еще амплитуда $\langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle$ перехода K^0 в \bar{K}^0 ; поэтому в правую часть первого уравнения надо еще добавить слагаемое

$$\langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle C_- = AC_-.$$

Аналогичное слагаемое AC_+ надо добавить и в уравнение, определяющее скорость изменения C_- . Но это еще не все! Если уж мы учитываем двухпионный эффект, то надо учесть и то, что существует еще *дополнительная* амплитуда превращения K^0 в *самого себя* по цепочке



Эта дополнительная амплитуда (обозначим ее $\langle K^0 | W | K^0 \rangle$) в точности равна амплитуде $\langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle$, так как амплитуды перехода в пару π -мезонов или от пары π -мезонов в K^0 или \bar{K}^0 одни и те же.

Если угодно, можно показать это и подробнее. Прежде всего напишем *

$$\langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle = \langle \bar{K}^0 | W | 2\pi \rangle \langle 2\pi | W | K^0 \rangle$$

и

$$\langle K^0 | W | K^0 \rangle = \langle K^0 | W | 2\pi \rangle \langle 2\pi | W | K^0 \rangle.$$

Симметрия между материей и антиматерией требует, чтобы

$$\langle 2\pi | W | K^0 \rangle = \langle 2\pi | W | \bar{K}^0 \rangle,$$

а также

$$\langle K^0 | W | 2\pi \rangle = \langle \bar{K}^0 | W | 2\pi \rangle.$$

Отсюда $\langle K^0 | W | K^0 \rangle = \langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle$, а также $\langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle = \langle K^0 | W | \bar{K}^0 \rangle$, о чём мы уже говорили выше.

Итак, у нас есть две дополнительные амплитуды $\langle K^0 | W | K^0 \rangle$ и $\langle \bar{K}^0 | W | \bar{K}^0 \rangle$, обе равные A , которые надо вставить в уравнения Гамильтона. Первая приводит к слагаемому AC_+ в правой части уравнения для dC_+/dt , а вторая — к слагаемому AC_- в правой части уравнения для dC_-/dt . Рассуждая именно так, Гелл-Мани и Пайс пришли к заключению, что уравнения Гамильтона для системы $K^0\bar{K}^0$ должны иметь вид

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dC_+}{dt} &= E_0 C_+ + AC_- + AC_+, \\ i\hbar \frac{dC_-}{dt} &= E_0 C_- + AC_+ + AC_-. \end{aligned} \quad (9.47)$$

Теперь надо сделать поправку к сказанному в прежних главах: к тому, что две амплитуды, такие, как $\langle K^0 | W | \bar{K}^0 \rangle$ и $\langle \bar{K}^0 | W | K^0 \rangle$, выражающие обратные друг к другу процессы, всегда комплексно сопряжены. Это было бы верно, если бы мы говорили о частицах, которые не распадаются. Но если частицы могут распадаться, а поэтому «пропадать», то амплитуды не обязательно комплексно сопряжены. Значит, равенство (9.44) не означает, что наши амплитуды суть действительные числа. На самом деле они суть комплексные числа. Поэтому коэффициент A комплексный и его нельзя просто включить в энергию E_0 .

Часто, возясь со спинами электронов и тому подобными веществами, наши герои знали: такие уравнения означают, что имеется другая пара базисных состояний с особенно простым поведением, которые также пригодны для представления системы K -частиц. Они рассуждали так: «Возьмем теперь сумму и разность этих

* Мы здесь упрощаем. Система 2π может иметь множество состояний, отвечающих различным импульсам π -мезонов, и в правой части этого равенства следовало бы поставить сумму по всем базисным состояниям π -мезонов. Но полный вывод все равно приводит к тем же результатам.

двух уравнений. Будем отсчитывать все энергии от E_0 и возьмем для энергии и времени такие единицы, при которых $\hbar=1$. (Так всегда поступают современные теоретики. Это не меняет, конечно, физики, но уравнения выглядят проще.) В результате они получили

$$i \frac{d}{dt} (C_+ + C_-) = 2A (C_+ + C_-), \quad i \frac{d}{dt} (C_+ - C_-) = 0, \quad (9.48)$$

откуда ясно, что комбинации амплитуд $C_+ + C_-$ и $C_+ - C_-$ действуют друг от друга независимо (и отвечают стационарным состояниям, которые мы раньше изучали). Они заключили, что удобнее было бы для K -частиц употреблять другое представление. Они определили два состояния:

$$\begin{aligned} |K_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|K^0\rangle + |\bar{K}^0\rangle), \\ |K_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|K^0\rangle - |\bar{K}^0\rangle) \end{aligned} \quad (9.49)$$

и сказали, что вместо того, чтобы думать о K^0 - и \bar{K}^0 -мезонах, с равным успехом можно рассуждать на языке двух «частиц» (т. е. «состояний») K_1 и K_2 . (Они, конечно, соответствуют состояниям, которые мы обычно называли $|I\rangle$ и $|II\rangle$. Мы не пользуемся нашими старыми обозначениями, потому что хотим следовать обозначениям самих авторов, тем, которые вы встретите на физических семинарах.)

Но Гелл-Манн и Пайс проделывали все это не для того, чтобы давать частицам новые названия; во всем этом имеется еще некоторая весьма странная физика. Пусть C_1 и C_2 суть амплитуды того, что некоторое состояние $|\psi\rangle$ окажется либо K_1 , либо K_2 -мезоном:

$$C_1 = \langle K_1 | \psi \rangle, \quad C_2 = \langle K_2 | \psi \rangle.$$

Из уравнений (9.49)

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (C_+ + C_-), \quad C_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (C_+ - C_-). \quad (9.50)$$

Тогда (9.48) превращается в

$$i \frac{dC_1}{dt} = 2AC_1, \quad i \frac{dC_2}{dt} = 0. \quad (9.51)$$

Их решения имеют вид

$$C_1(t) = C_1(0) e^{-i2At}, \quad C_2(t) = C_2(0), \quad (9.52)$$

где $C_1(0)$ и $C_2(0)$ — амплитуды при $t=0$.

Эти уравнения говорят, что если нейтральный K -мезон при $t=0$ находится в состоянии $|K_1\rangle$ [так что $C_1(0)=1$ и

$C_2(0) = 0$], то амплитуды в момент t таковы:

$$C_1(t) = e^{-i2At}, \quad C_2(t) = 0.$$

Вспоминая, что A — комплексное число, удобно положить

$$2A = \alpha - i\beta$$

(так как мнимая часть $2A$ оказывается отрицательной, мы пишем ее как минус $i\beta$). После такой подстановки $C_1(t)$ принимает вид

$$C_1(t) = C_1(0) e^{-\beta t} e^{-i\alpha t}. \quad (9.53)$$

Вероятность обнаружить в момент t частицу K_1 равна квадрату модуля этой амплитуды, т. е. $e^{-2\beta t}$. А из (9.52) следует, что вероятность обнаружить в любой момент состояние K_2 равна нулю. Это значит, что если вы создаете K -мезон в состоянии $|K_1\rangle$, то вероятность найти его в том же состоянии со временем экспоненциально падает, но вы никогда не увидите его в состоянии $|K_2\rangle$. Куда же он девается? Он распадается на два π -мезона со средним временем жизни $\tau = 1/2\beta$, экспериментально равным 10^{-10} сек. Мы предусмотрели это, говоря, что A комплексное.

С другой стороны, (9.52) утверждают, что если создать K -мезон целиком в состоянии K_2 , он останется в нем навсегда. На самом деле это не так. На опыте замечено, что он распадается на три π -мезона, но в 600 раз медленнее, чем при описанном нами двухпионном распаде. Значит, имеются какие-то другие малые члены, которыми мы в нашем приближении пренебрегли. Но до тех пор, пока мы рассматриваем только двухпионные распады, K_2 остается «навсегда».

Рассказ о Гелл-Манне и Пайсе близится к концу. Дальше они посмотрели, что будет, когда K -мезон образуется вместе с Λ^0 -частицей в сильном взаимодействии. Раз его странность должна быть +1, он обязан возникать в состоянии K^0 . Значит, при $t=0$ он не является ни K_1 , ни K_2 , а их смесью. Начальные условия таковы:

$$C_+(0) = 1, \quad C_-(0) = 0.$$

Но это означает [из (9.50)], что

$$C_1(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad C_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

а из (9.52) следует, что

$$C_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\beta t} e^{-i\alpha t}, \quad C_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (9.54)$$

Теперь вспомним, что K_1 и K_2 суть линейные комбинации K^0 и \bar{K}^0 . В (9.54) амплитуды были выбраны так, что при $t=0$ части,

из которых состоит K^0 , взаимно уничтожаются за счет интерференции, оставляя только состояние K^0 . Но состояние $|K_1\rangle$ со временем меняется, а состояние $|K_2\rangle$ — нет. После $t=0$ интерференция C_1 и C_2 приведет к конечным амплитудам и для K^0 , и для \bar{K}^0 .

Что же все это значит? Возвратимся назад и подумаем об опыте, показанном на фиг. 9.5. Там π^- -мезон образовал Λ^0 -частицу и K^0 -мезон, который летит без оглядки сквозь водород камеры. Когда он движется, существует ничтожный, но постоянный шанс, что он столкнется с ядром водорода. Раньше мы думали, что сохранение странных предохранит K -мезон от образования Λ^0 -частицы в таком взаимодействии. Теперь, однако, мы понимаем, что это не так. Потому что, хотя наш K -мезон вначале является K^0 -мезоном, неспособным к рождению Λ^0 -частицы, он не остается им навечно. Через мгновение появляется некоторая амплитуда того, что он перейдет в состояние \bar{K}^0 . Значит, следует ожидать, что иногда мы увидим Λ^0 -частицу, образованную вдоль следа K -мезона. Вероятность такого происшествия дается амплитудой C_- , которую можно [решая (9.50)] связать с C_1 и C_2 . Связь эта такова:

$$C_- = \frac{1}{\sqrt{2}} (C_1 - C_2) = \frac{1}{2} (e^{-\beta t} e^{-i\alpha t} - 1). \quad (9.55)$$

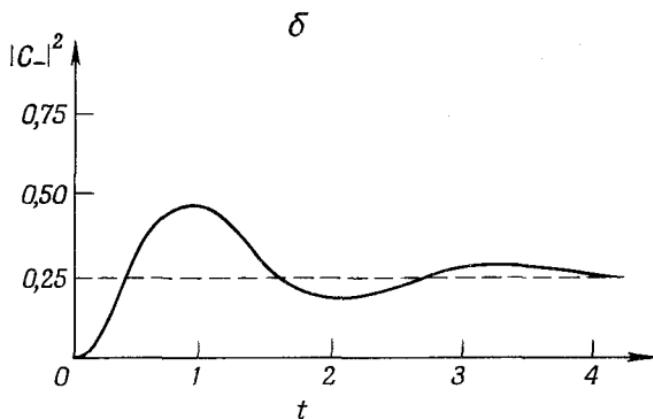
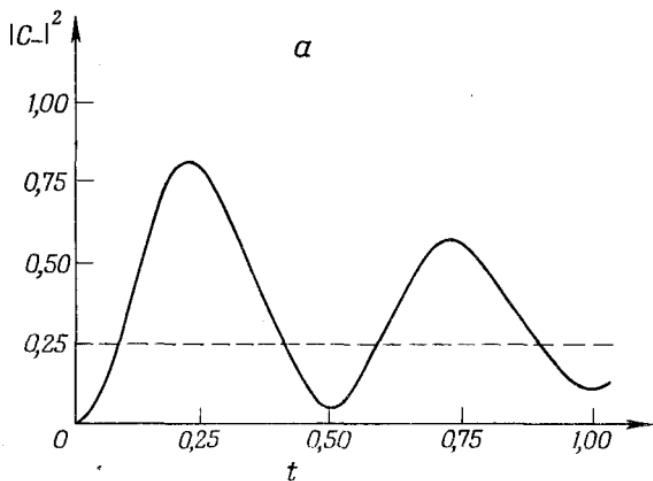
И когда K -частица движется, вероятность того, что она будет «действовать как» \bar{K}^0 , равна $|C_-|^2$, т. е.

$$|C_-|^2 = \frac{1}{4} (1 + e^{-2\beta t} - 2e^{-\beta t} \cos \alpha t). \quad (9.56)$$

Сложный и поразительный результат!

Это и есть замечательное предсказание Гелл-Манна и Пайса: когда возникает K^0 -мезон, то шанс, что он превратится в \bar{K}^0 -мезон, продемонстрировав это возможностью создания Λ^0 -частицы, меняется со временем по закону (9.56). Это предсказание последовало только из чистейших логических рассуждений и из основных принципов квантовой механики без знания внутренних механизмов K -частицы. И поскольку никто не знает ничего об этом внутреннем механизме, то дальше этого Гелл-Манн и Пайс не смогли продвинуться. Им не удалось дать теоретических значений α и β . И никто до сегодняшнего дня не смог это сделать. Им было по силам оценить значение β из экспериментально наблюдаемой скорости распада на два π -мезона ($2\beta = 1,1 \cdot 10^{10}$ сек $^{-1}$), но про α они ничего не смогли сказать.

Мы изобразили функцию (9.56) для двух значений α на фиг. 9.6. Видно, что форма ее сильно зависит от отношения α и β . Наблюдать \bar{K}^0 -мезон сперва нет никакой вероятности, но затем она появляется. Если значение α велико, вероятность



Фиг. 9.6. Функция (9.56).

a — для $\alpha = 8\pi\beta$; b — для $\alpha = 2\pi\beta$ (при $2\beta = 10^{10}$ сек $^{-1}$);
время t отложено в 10^{-10} сек

сильно осциллирует; если оно мало, осцилляции невелики или вовсе отсутствуют, вероятность просто плавно возрастает до $1/4$.

Как правило, K -мезоны движутся с постоянной скоростью, близкой к скорости света. Тогда кривые фиг. 9.6 также представляют вероятность наблюдения \bar{K}^0 -мезона вдоль следа с типичными расстояниями порядка нескольких сантиметров. Теперь вы видите, отчего это предсказание так удивительно своеобразно. Вы создаете отдельную частицу, и она не просто распадается, а проделывает нечто совсем иное. Временами она распадается, а порой превращается в частицу другого сорта. Характеристическая вероятность этого эффекта по мере ее движения меняется очень странно. Ничего другого, похожего на это,

в природе нет. И это удивительнейшее предсказание было сделано только на основе рассуждений об интерференции амплитуд.

Если и существует какое-то место, где есть шанс проверить главные принципы квантовой механики самым прямым образом — бывает ли суперпозиция амплитуд или не бывает, — то оно именно здесь. Несмотря на то что этот эффект был предсказан уже несколько лет тому назад, до сих пор достаточно ясного опытного определения еще не было. Имеются некоторые грубые результаты, указывающие, что значение α не равно нулю и что эффект действительно наблюдается: они свидетельствуют, что α по порядку величины равно β . И это все, что мы знаем из эксперимента. Было бы замечательно, если бы удалось точно проверить и посмотреть, действительно ли работает принцип суперпозиции в этом таинственном мире странных частиц — с неизвестными поводами для распадов и неизвестным поводом существования странности *.

Анализ, который мы только что привели, — характерный пример того, как сегодня используется квантовая механика, чтобы разгадать странные частицы. Во всех сложных теориях, о которых вы, быть может, слышали, нет ничего сверх этого элементарного фокуса, использующего принципы суперпозиции и другие принципы квантовой механики того же уровня. Некоторые утверждают, что у них есть теории, с помощью которых можно подсчитать β и α или по крайней мере α при данном β . Но эти теории совершенно бесполезны. Например, теория, предсказывающая значение α при данном β , говорит, что α должно быть бесконечным. Система уравнений, из которой они исходят, включает два π -мезона и затем возвращается от двух π -мезонов обратно к K^0 -мезону и т. д. Если все выкладки проделать, то действительно возникает пара уравнений, похожих на те, что у нас получались, но, поскольку у двух π -мезонов имеется бесконечно много состояний, зависящих от их импульсов, интегрирование по всем возможностям приводит к α , равному бесконечности. А природное α не бесконечно. Значит, динамические теории неверны. На самом деле чрезвычайно поразительно, что *единственные* явления, которые могут быть в мире странных частиц предсказаны, вытекают из принципов квантовой механики на том уровне, на котором вы их сейчас изучаете.

* Такую интерференцию действительно наблюдали. Коэффициент α оказался равным $-0,96\beta$. Отсюда можно было вычислить и разность масс K_1 - и K_2 -мезонов. Она оказалась равной около $-0,35 \cdot 10^{-5}$ эв. Это наименьшая разность масс двух частиц, известных физикам. — Прим. ред.

§ 6. Обобщение на системы с N состояниями

Мы покончили с системами с двумя состояниями, рассказав все, что хотелось. В дальнейших главах мы перейдем к изучению систем с большим числом состояний. Расширение на системы с N состояниями идей, разработанных для двух состояний, проходит довольно просто. Это делается примерно так.

Если система обладает N различными состояниями, то всякое состояние $|\psi(t)\rangle$ можно представить как линейную комбинацию произвольной совокупности базисных состояний $|i\rangle$, где $i=1, 2, 3, \dots, N$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\text{все } i} |i\rangle C_i(t). \quad (9.57)$$

Коэффициенты $C_i(t)$ — это амплитуды $\langle i | \psi(t) \rangle$. Поведение амплитуд C_i во времени направляется уравнениями

$$i\hbar \frac{dC_i(t)}{dt} = \sum_j H_{ij} C_j, \quad (9.58)$$

где энергетическая матрица H_{ij} описывает физику задачи. С виду она такая же, как и для двух состояний. Но только теперь i , и j должны пробегать по всем N базисным состояниям, и энергетическая матрица H_{ij} (или, если вам больше нравится, гамильтониан) — это теперь матрица $N \times N$, состоящая из N^2 чисел. Как и прежде, $H_{ij}=H_{ji}$ (до тех пор, пока частицы сохраняются) и диагональные элементы H_{ii} суть вещественные числа.

Мы нашли общее решение для всех C в системе с двумя состояниями, когда энергетическая матрица постоянна (не зависит от t). Точно так же нетрудно решить и уравнение (9.58) для системы с N состояниями, когда H не зависит от времени. Опять мы начинаем с того, что ищем возможное решение, в котором у всех амплитуд зависимость от времени *одинакова*. Мы пробуем

$$C_i = a_i e^{-(i/\hbar) Et}. \quad (9.59)$$

Если все эти C_i подставить в (9.58), то производные $dC_i(t)/dt$ превращаются просто в $(-i/\hbar) EC_i$. Сокращая повсюду на общую экспоненту, получаем

$$Ea_i = \sum_j H_{ij}a_j. \quad (9.60)$$

Эта система N линейных алгебраических уравнений для N неизвестных a_1, a_2, \dots, a_n ; решение у нее бывает только тогда, когда вам сильно повезет, когда определитель из коэффициентов при всех a равен нулю. Но не нужно чересчур умничать: можете просто начать их решать любым способом, и вы сразу увидите,

что решить их удается лишь при некоторых значениях E . (Вспомните, что единственная величина, которая в этих уравнениях подлежит подгонке, это E .)

Если, впрочем, вы хотите, чтобы все было по форме, перепишите (9.60) так:

$$\sum_j (H_{ij} - \delta_{ij}E) a_j = 0. \quad (9.61)$$

Затем примените правило (если оно вам знакомо), что эти уравнения будут иметь решения лишь для тех значений E , для которых

$$\text{Det}(H_{ij} - \delta_{ij}E) = 0. \quad (9.62)$$

Каждый член в детерминанте — это просто H_{ij} и только из диагональных отнято E . Иначе говоря, (9.62) означает просто

$$\begin{vmatrix} H_{11} - E & H_{12} & H_{13} & \dots \\ H_{21} & H_{22} - E & H_{23} & \dots \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} - E & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 0. \quad (9.63)$$

Это, конечно, всего-навсего особый способ записывать алгебраические уравнения для E , складывая вереницы членов, перемножаемых в определенном порядке. Эти произведения дадут все степени E вплоть до E^N .

Значит, у нас есть многочлен N -й степени, который равняется нулю. У него, вообще говоря, есть N корней. (Нужно помнить, однако, что некоторые из них могут быть кратными корнями; это значит, что два или более корней могут быть равны друг другу.) Обозначим эти N корней так:

$$E_I, E_{II}, E_{III}, \dots, E_n, \dots, E_N \quad (9.64)$$

(пусть n обозначает n -е порядковое числительное, так что n принимает значения I, II, \dots, N). Некоторые из этих энергий могут быть между собой равны, скажем $E_{II}=E_{III}$, но мы решили все же обозначать их разными именами.

Уравнения (9.60) или (9.61) имеют по одному решению для каждого значения E [из (9.64)]. Если вы подставите любое из E , скажем E_n , в (9.60) и найдете все a_i , то получится ряд чисел a_i , относящихся к энергии E_n . Этот ряд мы обозначим $a_i(n)$.

Если подставить эти $a_i(n)$ в (9.59), то получатся амплитуды $C_i(n)$ того, что состояния с определенной энергией находятся в базисном состоянии $|i\rangle$. Пусть $|n\rangle$ обозначает вектор состояния для состояния с определенной энергией при $t=0$. Тогда можно написать

$$C_i(n) = \langle i | n \rangle e^{(i/\hbar) E_n t},$$

где

$$\langle i | \mathbf{n} \rangle = a_i(\mathbf{n}). \quad (9.65)$$

Полное состояние с определенной энергией $|\psi_n(t)\rangle$ можно тогда записать так:

$$|\psi_n(t)\rangle = \sum_i |i\rangle a_i(\mathbf{n}) e^{-(i/\hbar) E_n t},$$

или

$$|\psi_n(t)\rangle = |\mathbf{n}\rangle e^{-(i/\hbar) E_n t}. \quad (9.66)$$

Векторы состояний $|\mathbf{n}\rangle$ описывают конфигурацию состояний с определенной энергией, но с вынесенной зависимостью от времени. Это постоянные векторы, которые, если мы захотим, можно использовать в качестве новой базисной совокупности.

Каждое из состояний $|\mathbf{n}\rangle$ обладает тем свойством (в чем легко убедиться), что при действии на него оператором Гамильтона \hat{H} получится просто E_n , умноженное на то же состояние:

$$\hat{H} |\mathbf{n}\rangle = E_n |\mathbf{n}\rangle. \quad (9.67)$$

Значит, энергия E_n — это характеристическое число оператора Гамильтона \hat{H} . Как мы видели, у гамильтониана в общем случае бывает несколько характеристических энергий. Физики обычно называют их «собственными значениями» матрицы \hat{H} . Для каждого собственного значения \hat{H} , иными словами, для каждой энергии, существует состояние с определенной энергией, которое мы называли «стационарным». Состояния $|\mathbf{n}\rangle$ обычно именуются «собственными состояниями \hat{H} ». Каждое собственное состояние отвечает определенному собственному значению E_n .

Далее, состояния $|\mathbf{n}\rangle$ (их N штук) могут, вообще говоря, тоже быть выбраны в качестве базиса. Для этого все состояния должны быть ортогональны в том смысле, что для любой пары их, скажем $|\mathbf{n}\rangle$ и $|\mathbf{m}\rangle$,

$$\langle \mathbf{n} | \mathbf{m} \rangle = 0. \quad (9.68)$$

Это выполнится автоматически, если все энергии различны. Кроме того, можно умножить все $a_i(\mathbf{n})$ на подходящие множители, чтобы все состояния были отнормированы: чтобы для всех \mathbf{n} было

$$\langle \mathbf{n} | \mathbf{n} \rangle = 1. \quad (9.69)$$

Когда оказывается, что (9.63) случайно имеет два (или больше) одинаковых корня с одной и той же энергией, то появляются небольшие усложнения. По-прежнему имеются две различные совокупности a_i , отвечающие двум одинаковым энергиям, но

состояния, которые они дают, не обязательно ортогональны. Пусть вы проделали нормальную процедуру и нашли два стационарных состояния с равными энергиями. Обозначим их $|\mu\rangle$ и $|\nu\rangle$. Тогда они не обязательно окажутся ортогональными: если вам не повезло, то обнаружите, что

$$\langle\mu|\nu\rangle \neq 0.$$

Но зато всегда верно, что можно изготовить два новых состояния (обозначим их $|\mu'\rangle$ и $|\nu'\rangle$) с теми же энергиями, но ортогональных друг другу:

$$\langle\mu'|\nu'\rangle = 0. \quad (9.70)$$

Этого можно добиться, составив $|\mu'\rangle$ и $|\nu'\rangle$ из подходящих линейных комбинаций $|\mu\rangle$ и $|\nu\rangle$ с так подобранными коэффициентами, что (9.70) будет выполнено. Это всегда полезно делать, и мы будем вообще предполагать, что это уже сделано, так что можно будет считать наши собственноеэнергетические состояния $|\mathbf{n}\rangle$ все ортогональными.

Для интереса докажем, что когда два стационарных состояния обладают разными энергиями, то они действительно ортогональны. Для состояния $|\mathbf{n}\rangle$ с энергией $E_{\mathbf{n}}$

$$\hat{H}|\mathbf{n}\rangle = E_{\mathbf{n}}|\mathbf{n}\rangle. \quad (9.71)$$

Это операторное уравнение на самом деле означает, что имеется соотношение между числами. Если заполнить недостающие части, то оно означает то же самое, что и

$$\sum_j \langle i | \hat{H} | j \rangle \langle j | \mathbf{n} \rangle = E_{\mathbf{n}} \langle i | \mathbf{n} \rangle. \quad (9.72)$$

Проделав здесь комплексное сопряжение, получим

$$\sum_j \langle i | \hat{H} | j \rangle^* \langle j | \mathbf{n} \rangle^* = E_{\mathbf{n}}^* \langle i | \mathbf{n} \rangle^*. \quad (9.73)$$

Теперь вспомним, что комплексно сопряженная амплитуда — это амплитуда обратного процесса, так что (9.73) можно переписать в виде

$$\sum_j \langle \mathbf{n} | j \rangle \langle j | \hat{H} | i \rangle = E_{\mathbf{n}}^* \langle \mathbf{n} | i \rangle. \quad (9.74)$$

Поскольку это уравнение справедливо для *всякого* i , то его можно «сократить» до

$$\langle \mathbf{n} | \hat{H} = E_{\mathbf{n}}^* \langle \mathbf{n} |. \quad (9.75)$$

Это уравнение называется *сопряженным* с (9.71).

Теперь легко доказать, что E_n — число вещественное. Умножим (9.71) на $\langle n |$. Получится

$$\langle n | \hat{H} | n \rangle = E_n \quad (9.76)$$

(с учетом, что $\langle n | n \rangle = 1$). Умножим теперь (9.75) справа на $| n \rangle$:

$$\langle n | \hat{H} | n \rangle = E_n^*. \quad (9.77)$$

Сравнивая (9.76) с (9.77), видим, что

$$E_n = E_n^*, \quad (9.78)$$

а это означает, что E_n вещественно. Звездочку при E_n в (9.75) можно убрать.

Теперь наконец-то мы в силах доказать, что состояния с различными энергиями ортогональны. Пусть $| n \rangle$ и $| m \rangle$ — пара базисных состояний с определенными энергиями. Написав (9.75) для состояния $| m \rangle$ и умножив его на $| n \rangle$, получим

$$\langle m | \hat{H} | n \rangle = E_m \langle m | n \rangle.$$

Но если (9.71) умножить на $\langle m |$, то будет

$$\langle m | \hat{H} | n \rangle = E_n \langle m | n \rangle.$$

Раз левые части этих уравнений равны, то равны и правые:

$$E_m \langle m | n \rangle = E_n \langle m | n \rangle. \quad (9.79)$$

Если $E_m = E_n$, то это равенство ни о чем не говорит. Но если энергии двух состояний $| m \rangle$ и $| n \rangle$ различны ($E_m \neq E_n$), то уравнение (9.79) говорит, что $\langle m | n \rangle$ должно быть нулем, что мы и хотели доказать. Два состояния обязательно ортогональны, если только E_n и E_m отличаются друг от друга.

Глава 10

СВЕРХТОНКОЕ РАСПЩЕПЛЕНИЕ В ВОДОРОДЕ

§ 1. Базисные состояния для системы двух частиц со спином $\frac{1}{2}$

§ 1. Базисные состояния для системы двух частиц со спином $\frac{1}{2}$

§ 2. Гамильтониан основного состояния водорода

В этой главе мы займемся «сверхтонким расщеплением» водорода — интересным примером того, что мы уже в состоянии делать с помощью квантовой механики. Здесь у нас уже будут не два состояния, а больше. Поучительность этого примера в том, что он познакомит нас с методами квантовой механики, применяемыми в более сложных задачах. Сам по себе этот пример достаточно сложен, и как только вы поймете, как с ним справляться, вам сразу же станет ясно, как обобщить его на другие возможные задачи.

§ 3. Уровни энергии

§ 4. Зеемановское расщепление

§ 5. Состояния в магнитном поле

§ 6. Проекционная матрица для спина 1

Как известно, атом водорода состоит из электрона и протона; электрон сидит неподалеку от протона и может существовать в одном из многих дискретных энергетических состояний, в каждом из которых его картина движения другая. Так, первое возбужденное состояние лежит на $\frac{3}{4}$ ридберга, или на 10 эв, выше основного состояния. Но даже так называемое основное состояние водорода на самом деле не является отдельным состоянием с определенной энергией, ибо у электрона и у протона есть спины. Эти спины и ответственны за «сверхтонкую структуру» в уровнях энергии, которая расщепляет все уровни энергии на несколько почти одинаковых уровней.

Спин электрона может быть направлен либо вверх, либо вниз; у протона тоже *его собственный* спин может смотреть вверх или вниз. Поэтому на всякое динамическое состояние атома приходятся *четыре* возможных спиновых состояния. Иначе говоря, когда физик говорит об «основном состоянии» водорода, он на самом деле имеет в виду «четыре основных состояния»,

а не просто самое низкое из них. У четырех спиновых состояний энергия не совсем одинакова; имеются небольшие сдвиги по отношению к тому, что наблюдалось бы в отсутствие спинов. Эти сдвиги, однако, во много-много раз меньше, чем те 10 эв, которые лежат между основным состоянием и следующим более высоким состоянием.

В итоге энергия каждого динамического состояния расщеплена на ряд очень тесных уровней — это так называемое *сверхтонкое расщепление*.

Разности энергий четырех спиновых состояний — это и есть то, что мы хотим рассчитать в этой главе. Сверхтонкое расщепление вызывается взаимодействием магнитных моментов электрона и протона; оно приводит для каждого спинового состояния к слегка отличающимся магнитным энергиям. Эти сдвиги энергии составляют только около десятимиллионной части электронвольта, что действительно много меньше 10 эв!

Именно из-за столь большого промежутка основное состояние водорода мы вправе считать «четырехуровневой системой», не заботясь о том, что на самом-то деле при более высоких энергиях состояний куда больше. Мы намерены ограничиться здесь изучением сверхтонкой структуры только основного состояния атома водорода.

Для наших целей нам неважны различные детали расположения электрона и протона, потому что все они, так сказать, уже выработаны атомом, все они получились сами собой, когда атом попал в основное состояние. Достаточно знать только, что электрон и протон находятся невдалеке друг от друга, в каком-то определенном пространственном соотношении. Кроме того, у них могут быть всевозможные взаимные ориентации спинов. И мы хотим рассмотреть только спиновые эффекты.

Первый вопрос, на который нужно ответить: каковы *базисные состояния* для этой системы? Но вопрос этот поставлен неправильно. Такой вещи, как *единственный* базис, не существует, а всякая система базисных состояний, которую вы выберете, не будет единственной. Всегда можно составить новые системы из линейных комбинаций старой. Для базисных состояний всегда есть множество выборов и все они одинаково законны.

Значит, надо спрашивать: не «каков базис?», а «каким его можно выбрать?». И выбрать вы вправе какой угодно, лишь бы вам было удобно.

Обычно лучше всего начинать с базиса, который *физически* наиболее очевиден. Он не обязательно должен решать какую-то задачу или быть *непосредственно* важным в каком-то отношении, нет, он в общем должен только облегчать понимание того, что происходит.

Мы выбираем следующие базисные состояния:

Состояние 1. И у электрона, и у протона спины смотрят вверх.

Состояние 2. У электрона спин смотрит вверх, а у протона — вниз.

Состояние 3. У электрона спин смотрит вниз, а у протона — вверх.

Состояние 4. И у электрона, и у протона спины смотрят вниз.

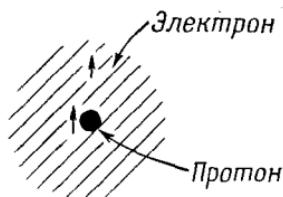
Для краткой записи этих четырех состояний введем следующие обозначения:

- | | |
|---|--|
| <i>Состояние 1:</i> $ + \ + \rangle$; | у электрона спин <i>вверх</i> ,
у протона спин <i>вверх</i> . |
| <i>Состояние 2:</i> $ + \ - \rangle$; | у электрона спин <i>вверх</i> ,
у протона спин <i>вниз</i> . |
| <i>Состояние 3:</i> $ - \ + \rangle$; | у электрона спин <i>вниз</i> ,
у протона спин <i>вверх</i> . |
| <i>Состояние 4:</i> $ - \ - \rangle$; | у электрона спин <i>вниз</i> ,
у протона спин <i>вниз</i> . |
- (10.1)

Помните, что *первый* знак плюс или минус относится к электрону, *второй* — к протону. Чтобы эти обозначения были у вас под рукой, они сведены на фиг. 10.1. Временами будет удобнее обозначать эти состояния $| 1 \rangle$, $| 2 \rangle$, $| 3 \rangle$ и $| 4 \rangle$.

Вы можете сказать: «Но частицы взаимодействуют, и, может быть, эти состояния вовсе не являются правильными базисными состояниями. Получается, будто вы рассматриваете обе частицы независимо». Да, действительно! Взаимодействие ставит перед нами вопрос: каков гамильтониан системы? Но вопрос о том, как *описать* систему, не касается взаимодействия. Что бы мы ни выбрали в качестве базиса, это никак не связано с тем, что случится после. Может оказаться, что атом не способен *оставаться* в одном из этих базисных состояний, даже если с него все и началось. Но это другой вопрос. Это вопрос о том, как со временем меняются амплитуды в выбранном (фиксированном) базисе. Выбирая базисные состояния, мы просто выбираем «единичные векторы» для нашего описания.

Раз уже мы коснулись этого, бросим взгляд на общую проблему отыскания совокупности базисных состояний, когда имеется не одна частица, а больше. Вы знаете базисные состояния для одной частицы. Электрон, например, полностью описывается в реальной жизни (не в наших упрощенных случаях, а в реальной жизни) заданием амплитуд пребывания в одном из следую-



Фиг. 10.1. Совокупность базисных состояний для основного состояния атома водорода. Эти состояния мы обозначаем $| + + \rangle$, $| + - \rangle$, $| - + \rangle$, $| -- \rangle$.

щих состояний:

$|\text{Электрон спином вверх с импульсом } p\rangle$
или

$|\text{Электрон спином вниз с импульсом } p\rangle$.

В действительности существуют две бесконечные совокупности состояний, по одному на каждое значение p . Значит, сказать, что электронное состояние $|\psi\rangle$ описано полностью, можно лишь тогда, когда вы знаете все амплитуды

$$\langle +, p | \psi \rangle \text{ и } \langle -, p | \psi \rangle,$$

где $+$ и $-$ представляют компоненты момента количества движения вдоль какой-то оси, обычно оси z , а p — вектор импульса. Стало быть, для каждого мыслимого импульса должны быть две амплитуды (дважды бесконечная совокупность базисных состояний). Вот и все, что нужно для описания отдельной частицы.

Таким же образом могут быть написаны базисные состояния, когда частиц не одна, а больше. Например, если надо было бы рассмотреть электрон и протон в более сложном, чем у нас, случае, то базисные состояния могли бы быть следующими:

$|\text{Электрон с импульсом } p_1 \text{ движется спином вверх,}$
 $\text{а протон с импульсом } p_2 \text{ движется спином вниз}\rangle$.

И так далее для других спиновых комбинаций. Если частиц больше двух, идея остается та же. Так что вы видите, что расписать возможные базисные состояния на самом деле очень легко. Вопрос только в том, каков гамильтониан.

Нам для изучения основного состояния водорода нет нужды применять полные совокупности базисных состояний для различных импульсов. Мы оговариваем и фиксируем определенные импульсные состояния протона и электрона, когда произносим слова «основное состояние». Детали конфигурации — амплитуды для всех импульсных базисных состояний — можно рассчитать, но это уже другая задача. А мы сейчас касаемся только

влияния спина, так что ограничимся только четырьмя базисными состояниями (10.1). Очередной вопрос таков: каков гамильтониан для этой совокупности состояний?

§ 2. Гамильтониан основного состояния водорода

Через минуту вы это узнаете. Но прежде хочу вам напомнить одну вещь: всякое состояние всегда можно представить в виде линейной комбинации базисных состояний. Для любого состояния $|\psi\rangle$ можно написать

$$|\psi\rangle = |++\rangle \langle ++| \psi\rangle + |+-\rangle \langle +-| \psi\rangle + |-+\rangle \langle -+| \psi\rangle + |--\rangle \langle --| \psi\rangle. \quad (10.2)$$

Напомним, что полные скобки — это просто комплексные числа, так что их можно обозначить обычным образом через C_i , где $i=1, 2, 3$ или 4 , и записать (10.2) в виде

$$|\psi\rangle = |++\rangle C_1 + |+-\rangle C_2 + |-+\rangle C_3 + |--\rangle C_4. \quad (10.3)$$

Задание четверки амплитуд C_i полностью описывает спиновое состояние $|\psi\rangle$. Если эта четверка меняется во времени (как это и будет на самом деле), то скорость изменения во времени дается оператором \hat{H} . Задача в том, чтобы найти этот оператор \hat{H} .

Не существует общего правила, как писать гамильтониан атомной системы, и отыскание правильной формулы требует большего искусства, чем отыскание системы базисных состояний. Мы вам смогли дать общее правило, как записывать систему базисных состояний для любой задачи, в которой есть протон и электрон, но описать общий гамильтониан такой комбинации на этом уровне слишком трудно. Вместо этого мы подведем вас к гамильтониану некоторыми эвристическими рассуждениями, и вам придется признать его правильным, потому что результаты будут согласовываться с экспериментальными наблюдениями.

Вспомните, что в предыдущей главе мы смогли описать гамильтониан отдельной частицы со спином $1/2$, применив сигматрицы или в точности эквивалентные им сигма-операторы. Свойства операторов сведены в табл. 10.1. Эти операторы, являющиеся просто удобным, кратким способом запоминания матричных элементов типа $\langle +|\sigma_z|+\rangle$, были полезны для описания поведения отдельной частицы со спином $1/2$. Возникает вопрос, можно ли отыскать аналогичное средство для описания системы с двумя спинами. Да, и очень просто. Вот смотрите. Мы изобретем вещь, которую назовем «электрон-сигма» и которую будем представлять векторным оператором σ^e с тремя компонентами σ_x^e, σ_y^e и σ_z^e . Дальше условимся, что когда одна из них действует

$$\begin{aligned}\sigma_z |+\rangle &= +|+\rangle \\ \sigma_z |-\rangle &= -|-\rangle \\ \sigma_x |+\rangle &= +|- \rangle \\ \sigma_x |-\rangle &= +|+ \rangle \\ \sigma_y |+\rangle &= +i|-\rangle \\ \sigma_y |-\rangle &= -i|+ \rangle\end{aligned}$$

на какое-то из наших четырех базисных состояний атома водорода, то она действует на один только спин электрона, причем так, как если бы электрон был один, сам по себе. Пример: чему равно $\sigma_y^e |-\rangle$? Поскольку σ_y , действующее на электрон со спином вниз, дает $-i$, умноженное на состояние с электроном, у которого спин вверх, то

$$\sigma_y^e |-\rangle = -i|+\rangle.$$

(Когда σ_y^e действует на комбинированное состояние, оно переворачивает электрон, не затрагивая протон, и умножает результат на $-i$.) Действуя на другие состояния, σ_y^e даст

$$\begin{aligned}\sigma_y^e |+\rangle &= i|-\rangle, \\ \sigma_y^e |+-\rangle &= i|--\rangle, \\ \sigma_y^e |--\rangle &= -i|+-\rangle.\end{aligned}$$

Напомним еще раз, что оператор σ^e действует только на *первый спиновый символ*, т. е. на спин *электрона*.

Теперь определим соответствующий оператор «протон-сигма» для спина протона. Три его компоненты σ_x^p , σ_y^p , σ_z^p действуют так же, как и σ^e , но только на *протонный спин*. Например, если σ_x^p будет действовать на каждое из четырех базисных состояний, то получится (опять с помощью табл. 10.1)

$$\begin{aligned}\sigma_x^p |+\rangle &= |-\rangle, \\ \sigma_x^p |-\rangle &= |+\rangle, \\ \sigma_x^p |+-\rangle &= |--\rangle, \\ \sigma_x^p |--\rangle &= |+-\rangle.\end{aligned}$$

Как видите, ничего трудного.

В общем случае могут встретиться вещи и посложнее. Например, произведение операторов $\sigma_y^e \sigma_z^p$. Когда имеется такое про-

изведение, то сначала делается то, что хочет правый оператор, а потом — чего требует левый *. Например,

$$\sigma_x^e \sigma_z^p |+ -\rangle = \sigma_x^e (\sigma_z^p |+ -\rangle) = \sigma_x^e (-|+ -\rangle) = \\ = -\sigma_x^e |+ -\rangle = -|- -\rangle.$$

Заметьте, что эти операторы с числами ничего не делают; мы использовали это, когда писали $\sigma_x^e (-1) = (-1) \sigma_x^e$. Мы говорим, что операторы «коммутируют» с числами или что числа «могут пропасть» через оператор. Попрактикуйтесь и покажите, что произведение $\sigma_x^e \sigma_z^p$ дает для четырех состояний следующий результат:

$$\begin{aligned}\sigma_x^e \sigma_z^p |++\rangle &= +|-+\rangle, \\ \sigma_x^e \sigma_z^p |+-\rangle &= -|- -\rangle, \\ \sigma_x^e \sigma_z^p |-+\rangle &= +|++\rangle, \\ \sigma_x^e \sigma_z^p |--\rangle &= -|+-\rangle.\end{aligned}$$

Если перебрать все допустимые операторы, каждый по разу, то всего может быть 16 возможностей. Да, шестнадцать, если включить еще «единичный оператор» $\hat{1}$. Во-первых, есть тройка σ_x^e , σ_y^e , σ_z^e , затем тройка σ_x^p , σ_y^p , σ_z^p , итого шесть. Кроме того, имеется девять произведений вида $\sigma_x^e \sigma_y^p$, итого 15. И еще единичный оператор, оставляющий все состояния нетронутыми. Вот и все шестнадцать!

Заметьте теперь, что для системы с четырьмя состояниями матрица Гамильтона должна представлять собой матрицу коэффициентов 4×4 , в ней будет 16 чисел. Легко показать, что всякая матрица 4×4 , и в частности матрица Гамильтона, может быть записана в виде линейной комбинации шестнадцати двойных спиновых матриц, соответствующих системе операторов, которые мы только что составили. Поэтому для взаимодействия между протоном и электроном, в которое входят только их спины, мы можем ожидать, что оператор Гамильтона может быть записан в виде линейной комбинации тех же 16 операторов. Вопрос только в том, как.

Но, во-первых, мы знаем, что взаимодействие не зависит от нашего выбора осей для системы координат. Если нет внешнего возмущения — чего-то вроде магнитного поля, выделяющего какое-то направление в пространстве, — то гамильтониан не может зависеть от нашего выбора направлений осей x , y и z . Это означает, что в гамильтониане не может быть таких членов, как σ_x^e сам по себе. Это выглядело бы нелепо, потому что кто-ни-

* Для этих операторов, правда, оказывается, что от их порядка ничего не зависит.

будь в другой системе координат пришел бы к другим результатам.

Единственны возможны только член с единичной матрицей, скажем постоянная a (умноженная на 1), и некоторая комбинация сигм, которая не зависит от координат, некоторая «инвариантная» комбинация. Единственная скалярная инвариантная комбинация из двух векторов — это их скалярное произведение, имеющее для наших сигм вид

$$\sigma^e \cdot \sigma^p = \sigma_x^e \sigma_x^p + \sigma_y^e \sigma_y^p + \sigma_z^e \sigma_z^p. \quad (10.4)$$

Этот оператор инвариантен по отношению к любому повороту системы координат. Итак, единственная возможность для гамильтониана с подходящей симметрией в пространстве — это постоянная, умноженная на единичную матрицу, плюс постоянная, умноженная на это скалярное произведение, т. е.

$$\hat{H} = E_0 + A\sigma^e \cdot \sigma^p. \quad (10.5)$$

Это и есть наш гамильтониан. Это единственное, чему, исходя из симметрии в пространстве, он может равняться, пока нет внешнего поля. Постоянный член нам многоного не сообщает; он просто зависит от уровня, который мы выбрали для отсчета энергий. С равным успехом можно было принять $E_0 = 0$. А второй член поведает нам обо всем, что нужно для того, чтобы найти расщепление уровней в водороде.

Если угодно, можно размышлять о гамильтониане иначе. Если поблизости друг от друга находятся два магнита с магнитными моментами μ_e и μ_p , то их взаимная энергия зависит, кроме всего прочего, и от $\mu_e \cdot \mu_p$. А мы, как вы помните, выяснили, что та вещь, которую мы в классической физике называли μ_e , в квантовой механике выступает под именем $\mu_e \sigma_e$. Подобным же образом, то, что в классической физике выглядит как μ_p , в квантовой механике обычно оказывается равным $\mu_p \sigma_p$ (где μ_p — магнитный момент протона, который почти в 1000 раз меньше μ_e и имеет обратный знак). Значит, (10.5) утверждает, что энергия взаимодействия подобна взаимодействию двух магнитов, но не до конца, потому что взаимодействие двух магнитов зависит от расстояния между ними. Но (10.5) может считаться (и на самом деле является) своего рода средним взаимодействием. Электрон как-то движется внутри атома, и наш гамильтониан дает лишь среднюю энергию взаимодействия. В общем все это говорит о том, что для предписанного расположения электрона и протона в пространстве существует энергия, пропорциональная косинусу угла между двумя магнитными моментами (выражаясь классически). Такая классическая качественная картина может помочь вам понять, откуда все получается, но единственное

что важно при этом то, что (10.5) — это правильная квантовомеханическая формула.

Порядок величины классического взаимодействия между двумя магнитами должен был бы даваться произведением двух магнитных моментов, деленным на куб расстояния между ними. Расстояние между электроном и протоном в атоме водорода, грубо говоря, равно половине атомного радиуса, т. е. $0,5 \text{ \AA}$. Поэтому можно примерно прикинуть, что постоянная A должна быть равна произведению магнитных моментов μ_e и μ_p , деленному на куб половины ангстрема. Такая пристрелка приводит к числам, попадающим как раз в нужный район. Но оказывается, что A можно подсчитать и аккуратней, стоит только разобраться в полной теории атома водорода, что нам пока не по силам. На самом деле A было подсчитано с точностью до 30 миллионных. Как видите, в отличие от постоянной переброса A молекулы аммиака, которую по теории невозможно хорошо подсчитать, наша постоянная A для водорода может быть рассчитана из более детальной теории. Но ничего не поделаешь, нам для наших теперешних целей придется считать A числом, которое может быть определено из опыта, и анализировать физику дела.

Взяв гамильтониан (10.5), можно подставить его в уравнение

$$i\hbar C_i = \sum_j H_{ij} C_j \quad (10.6)$$

и посмотреть, что делает спиновое взаимодействие с уровнями энергии. Для этого надо подсчитать шестнадцать матричных элементов $H_{ij} = \langle i | H | j \rangle$, отвечающих любой двойке из четырех базисных состояний (10.1).

Начнем с того, что подсчитаем, чему равно $\hat{H} | j \rangle$ для каждого из четырех базисных состояний. К примеру,

$$\hat{H} | ++ \rangle = A \sigma^e \cdot \sigma^p | ++ \rangle = A \{ \sigma_x^e \sigma_x^p + \sigma_y^e \sigma_y^p + \sigma_z^e \sigma_z^p \} | ++ \rangle. \quad (10.7)$$

Пользуясь способом, описанным немного раньше (вспомните табл. 10.1, она очень облегчит дело), мы найдем, что каждая пара σ делает с $| ++ \rangle$. Ответ таков:

$$\begin{aligned} \sigma_x^e \sigma_x^p | ++ \rangle &= + | -- \rangle, \\ \sigma_y^e \sigma_y^p | ++ \rangle &= - | -- \rangle, \\ \sigma_z^e \sigma_z^p | ++ \rangle &= + | ++ \rangle. \end{aligned} \quad (10.8)$$

Значит, (10.7) превращается в

$$\hat{H} | ++ \rangle = A \{ | -- \rangle - | -- \rangle + | ++ \rangle \} = A | ++ \rangle. \quad (10.9)$$

Таблица 10.2

СПИНОВЫЕ ОПЕРАТОРЫ
ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА

$\sigma_x^e \sigma_x^p + + \rangle = + - - \rangle$
$\sigma_x^e \sigma_x^p + - \rangle = + - + \rangle$
$\sigma_x^e \sigma_x^p - + \rangle = + + - \rangle$
$\sigma_x^e \sigma_x^p -- \rangle = + ++ \rangle$
$\sigma_y^e \sigma_y^p + + \rangle = - - - \rangle$
$\sigma_y^e \sigma_y^p + - \rangle = + - + \rangle$
$\sigma_y^e \sigma_y^p - + \rangle = + + - \rangle$
$\sigma_y^e \sigma_y^p -- \rangle = - ++ \rangle$
$\sigma_z^e \sigma_z^p + + \rangle = + ++ \rangle$
$\sigma_z^e \sigma_z^p + - \rangle = - + - \rangle$
$\sigma_z^e \sigma_z^p - + \rangle = - - + \rangle$
$\sigma_z^e \sigma_z^p -- \rangle = + -- \rangle$

А раз все наши четыре базисных состояния ортогональны, то это немедленно приводит к

$$\begin{aligned} \langle + + | H | + + \rangle &= A \langle + + | + + \rangle = A, \\ \langle + - | H | + + \rangle &= A \langle + - | + + \rangle = 0, \\ \langle - + | H | + + \rangle &= A \langle - + | + + \rangle = 0, \\ \langle - - | H | + + \rangle &= A \langle - - | + + \rangle = 0. \end{aligned} \quad (10.10)$$

Вспоминая, что $\langle j | H | i \rangle = \langle i | H | j \rangle^*$, мы сразу сможем написать дифференциальное уравнение для амплитуды C_1 :

$$i\hbar \dot{C}_1 = H_{11}C_1 + H_{12}C_2 + H_{13}C_3 + H_{14}C_4, \quad (10.11)$$

или

$$i\hbar \dot{C}_1 = AC_1.$$

Вот и все! Только один член.

Чтобы теперь получить оставшиеся уравнения Гамильтона, мы должны терпеливо пройти через те же процедуры с \hat{H} , действующим на другие состояния. Во-первых, попрактикуйтесь в проверке того, что все произведения сигм в табл. 10.2 написаны правильно. Затем с их помощью получите

$$\begin{aligned} \hat{H} | + - \rangle &= A \{ 2 | - + \rangle - | + - \rangle \}, \\ \hat{H} | - + \rangle &= A \{ 2 | + - \rangle - | - + \rangle \}, \\ \hat{H} | -- \rangle &= A | -- \rangle. \end{aligned} \quad (10.12)$$

И тогда, умножая их все по порядку слева на все прочие векторы состояний, мы получаем следующую гамильтонову матрицу H_{ij} :

$$H_{ij} = \begin{array}{c} \overset{i \downarrow}{\vec{A}} \\ \left(\begin{array}{cccc} A & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -A & 2A & 0 \\ 0 & 2A & -A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A \end{array} \right). \end{array} \quad (10.13)$$

Это, конечно, означает, что дифференциальные уравнения для четырех амплитуд C_i имеют вид

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{C}_1 &= AC_1, \\ i\hbar\dot{C}_2 &= -AC_2 + 2AC_3, \\ i\hbar\dot{C}_3 &= 2AC_2 - AC_3, \\ i\hbar\dot{C}_4 &= AC_4. \end{aligned} \quad (10.14)$$

Но прежде чем перейти к их решению, трудно удержаться от того, чтобы не рассказать вам об одном умном правиле, которое вывел Дирак. Оно поможет вам ощутить, как много вы уже знаете, хотя нам в нашей работе оно и не понадобится. Из уравнений (10.9) и (10.12) мы имеем

$$\begin{aligned} \sigma^e \cdot \sigma^p |++> &= |++>, \\ \sigma^e \cdot \sigma^p |+-> &= 2|-,+> - |+->, \\ \sigma^e \cdot \sigma^p |-+> &= 2|+-> - |-->, \\ \sigma^e \cdot \sigma^p |--> &= |-->. \end{aligned} \quad (10.15)$$

«Взгляните, — сказал Дирак, — первое и последнее уравнения я могу записать также в виде

$$\begin{aligned} \sigma^e \cdot \sigma^p |++> &= 2|++> - |++>, \\ \sigma^e \cdot \sigma^p |--> &= 2|--> - |-->, \end{aligned}$$

и тогда все они станут похожими. Теперь я придумаю новый оператор, который обозначу $P_{\text{спин. обмен}}$ и который, по определению, будет обладать следующими свойствами *:

$$\begin{aligned} P_{\text{спин. обмен}} |++> &= |++>, \\ P_{\text{спин. обмен}} |+-> &= |-,+>, \\ P_{\text{спин. обмен}} |-+> &= |+->, \\ P_{\text{спин. обмен}} |--> &= |-->. \end{aligned}$$

* Этот оператор сейчас называют оператор обмена спинами.

Оператор этот, как видите, только обменивает направления спина у двух частиц. Тогда всю систему уравнений (10.15) я могу написать как одно простое операторное уравнение:

$$\sigma^e \cdot \sigma^p = 2P_{\text{спин. обмен}} - 1. \quad (10.16)$$

Это и есть формула Дирака. Оператор обмена спинами дает удобное правило для запоминания $\sigma^e \cdot \sigma^p$. (Как видите, вы теперь уже все умеете делать. Для вас все двери открыты.)

§ 3. Уровни энергии

Теперь мы готовы к тому, чтобы вычислить уровни энергии основного состояния водорода, решая гамильтоновы уравнения (10.14). Мы хотим найти энергии стационарных состояний. Это значит, что мы должны отыскать те особые состояния $|\psi\rangle$, для которых каждая из принадлежащих $|\psi\rangle$ амплитуд $C_i = \langle i | \psi \rangle$ обладает одной и той же зависимостью от времени, а именно $e^{-i\omega t}$. Тогда состояние будет обладать энергией $E = \hbar\omega$. Значит, мы ищем совокупность амплитуд, для которых

$$C_i = a_i e^{-(i/\hbar)Et}, \quad (10.17)$$

где четверка коэффициентов a_i не зависит от времени. Чтобы увидеть, можем ли мы получить эти амплитуды, подставим (10.17) в (10.14) и посмотрим, что из этого выйдет. Каждое $i\hbar dC_i/dt$ в (10.14) перейдет в EC_i . И после сокращения на общий экспоненциальный множитель каждое C_i превратится в a_i ; получим

$$\begin{aligned} Ea_1 &= Aa_1, \\ Ea_2 &= -Aa_2 + 2Aa_3, \\ Ea_3 &= 2Aa_2 - Aa_3, \\ Ea_4 &= Aa_4. \end{aligned} \quad (10.18)$$

Это и нужно решить для отыскания a_1, a_2, a_3 и a_4 . Право, очень мило со стороны первого уравнения, что оно не зависит от остальных,— а это значит, что одно решение сразу видно. Если выбрать $E=A$, то

$$a_1 = 1, \quad a_2 = a_3 = a_4 = 0$$

даст решение. (Конечно, если принять все a равными нулю, то это тоже будет решение, но состояния оно не даст!) Будем считать наше первое решение состоянием $|I\rangle$ *:

$$|I\rangle = |1\rangle = |++\rangle. \quad (10.19)$$

* В действительности состоянием является

$$|I\rangle e^{-(i/\hbar)Et},$$

но, как обычно, мы отождествим состояния с постоянными векторами, которые при $t=0$ совпадают с настоящими векторами.

Его энергия

$$E_I = A.$$

Все это немедленно дает ключ ко второму решению, получаемому из последнего уравнения в (10.18):

$$\begin{aligned} a_1 &= a_2 = a_3 = 0, & a_4 &= 1, \\ E &= A. \end{aligned}$$

Это решение мы назовем состоянием $|II\rangle$:

$$\begin{aligned} |II\rangle &= |4\rangle = |-\cdots\rangle, \\ E_{II} &= A. \end{aligned} \tag{10.20}$$

Дальше пойдет чуть труднее; оставшиеся два уравнения (10.18) переплетены одно с другим. Но мы все это уже делали. Сложив их, получим

$$E(a_2 + a_3) = A(a_2 + a_3). \tag{10.21}$$

Вычитая, будем иметь

$$E(a_2 - a_3) = -3A(a_2 - a_3). \tag{10.22}$$

Окидывая это взглядом и припоминая знакомый нам уже аммиак, мы видим, что здесь есть два решения:

$$\begin{aligned} a_2 &= a_3, & E &= A \\ \text{и} \quad a_2 &= -a_3, & E &= -3A. \end{aligned} \tag{10.23}$$

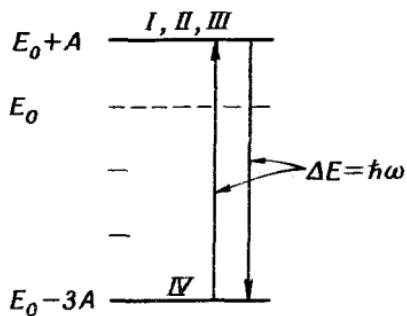
Это смеси состояний $|2\rangle$ и $|3\rangle$. Обозначая их $|III\rangle$ и $|IV\rangle$ и вставляя для правильной нормировки множитель $1/\sqrt{2}$, имеем

$$\begin{aligned} |III\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle + |3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle), \\ E_{III} &= A \end{aligned} \tag{10.24}$$

$$\begin{aligned} |IV\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|2\rangle - |3\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle), \\ E_{IV} &= -3A. \end{aligned} \tag{10.25}$$

Мы нашли четверку стационарных состояний и их энергии. Заметьте, кстати, что наши четыре состояния ортогональны друг другу, так что их тоже можно при желании считать базисными состояниями. Задача наша полностью решена.

У трех состояний энергия равна A , а у последнего $-3A$. Среднее равно нулю, а это означает, что когда в (10.5) мы выбрали $E_0 = 0$, то тем самым мы решили отсчитывать все энергии от их среднего значения. Диаграмма уровней энергии основного состояния водорода будет выглядеть так, как на фиг. 10.2.



Фиг. 10.2. Диаграмма уровней энергии основного состояния атомарного водорода.

Различие в энергиях между состоянием $|IV\rangle$ и любым из остальных равно $4A$. Атом, который случайно окажется в состоянии $|I\rangle$, может оттуда упасть в состояние $|IV\rangle$ и испустить свет: не оптический свет, потому что энергия очень мала, а микроволновой квант. Или, если осветить водородный газ микроволнами, мы заметим поглощение энергии, оттого что атомы в состоянии $|IV\rangle$ будут ее перехватывать и переходить в одно из высших состояний, но все это только на частоте $\omega=4A/\hbar$. Эта частота была измерена экспериментально; наилучший результат, полученный сравнительно недавно *, таков:

$$f = \frac{\omega}{2\pi} = (1\,420\,405\,751,800 \pm 0,028) \text{ Гц}. \quad (10.26)$$

Ошибка составляет только три стомилиардных! Вероятно, ни одна из фундаментальных физических величин не измерена лучше, чем эта; таково одно из наиболее выдающихся по точности измерений в физике. Теоретики были очень счастливы, когда им удалось вычислить энергию с точностью до $3 \cdot 10^{-5}$; но к этому времени она была измерена с точностью до $2 \cdot 10^{-11}$, т.е. в миллион раз точнее, чем в теории. Так что экспериментаторы идут далеко впереди теоретиков. В теории основного состояния атома водорода и *вы*, и мы находимся в одинаковом положении. Вы ведь тоже можете взять значение A из опыта — и вся кому, в конце концов, приходится делать то же самое.

Вы, вероятно, уже слышали раньше о «21-см линии» водорода. Это и есть длина волны спектральной линии в 1420 МГц между сверхтонкими состояниями. Излучение с такой длиной волны испускается или поглощается атомарным водородным газом в галактиках. Значит, с помощью радиотелескопов, настроенных на волны 21 см (или примерно на 1420 МГц), можно наблюдать скорости и расположение скоплений атомарного водорода. Измеряя интенсивность, можно оценить его количество. Измеряя сдвиг в частоте, вызываемый эффектом Доплера,

* S. G. M. T. P. K. L. E. R. P. N. G. R. A. M. S. E. Y., Physical Review Letters, 11, 338 (1963).

можно выяснить движение газа в галактике. Это одна из великих программ радиоастрономии. Так что мы с вами сейчас ведем речь о чем-то очень реальном, это вовсе не какая-то искусственная задача.

§ 4. Зеемановское расщепление

Хотя с задачей отыскания уровней энергии основного состояния водорода мы и справились, мы все же продолжим изучение этой интересной системы. Чтобы сказать о ней еще что-то, например чтобы подсчитать скорость, с какой атом водорода поглощает или испускает радиоволны длиной 21 см, надо знать, что с ним происходит, когда он возмущен. Нужно проделать то, что мы сделали с молекулой аммиака,— после того как мы нашли уровни энергии, мы отправились дальше и выяснили, что происходит, когда молекула находится в электрическом поле. И после этого нетрудно оказалось представить себе влияние электрического поля радиоволны. В случае атома водорода электрическое поле ничего с уровнями не делает, разве что сдвигает их все на некоторую постоянную величину, пропорциональную квадрату поля, а нам это неинтересно, потому что это не меняет разностей энергий. На сей раз важно уже магнитное поле. Значит, следующим шагом будет написать гамильтониан для более сложного случая, когда атом сидит во внешнем магнитном поле.

Каков же этот гамильтониан? Мы просто сообщим вам ответ, потому что никакого «доказательства» дать не можем, разве что сказать, что именно так устроен атом.

Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = A(\sigma^e \cdot \sigma^p) - \mu_e \sigma^e \cdot \mathbf{B} - \mu_p \sigma^p \cdot \mathbf{B}. \quad (10.27)$$

Теперь он состоит из трех частей. Первый член $A(\sigma^e \cdot \sigma^p)$ представляет магнитное взаимодействие между электроном и протоном; оно такое же, как если бы магнитного поля не было. Влияние внешнего магнитного поля проявляется в остальных двух членах. Второй член $(-\mu_e \sigma^e \cdot \mathbf{B})$ — это та энергия, которой электрон обладал бы в магнитном поле, если бы он там был один *. Точно так же последний член $(-\mu_p \sigma^p \cdot \mathbf{B})$ был бы энергией протона-одиночки. Согласно классической физике, энергия их обоих вместе была бы суммой их энергий; по квантовой механике это тоже правильно. Возникающая из-за наличия магнитного поля энергия взаимодействия равна просто сумме энергий

* Вспомните, что классически $U = -\mu \cdot \mathbf{B}$, так что энергия наименьшая, когда момент направлен по полю. Для положительно заряженных частиц магнитный момент параллелен спину, для отрицательных — наоборот. Значит, в (10.27) μ_p — число *положительное*, а μ_e — *отрицательное*.

взаимодействия электрона с магнитным полем и протона с тем же полем, выраженных через операторы сигма. В квантовой механике эти члены в действительности не являются энергиями, но обращение к классическим формулам для энергии помогает запоминать правила написания гамильтониана. Как бы то ни было, (10.27) — это правильный гамильтониан.

Теперь нужно вернуться к началу и решать всю задачу сначала. Но большая часть работы уже сделана, надо только добавить эффекты, вызываемые новыми членами. Примем, что магнитное поле \mathbf{B} постоянно и направлено по z . Тогда к нашему старому гамильтонову оператору \hat{H} надо добавить два новых куска; обозначим их \hat{H}' :

$$\hat{H}' = -(\mu_e \sigma_z^e + \mu_p \sigma_z^p) B.$$

Пользуясь табл. 10.1, мы сразу получаем

$$\begin{aligned}\hat{H}' |++\rangle &= -(\mu_e + \mu_p) B |++\rangle, \\ \hat{H}' |+-\rangle &= -(\mu_e - \mu_p) B |+-\rangle, \\ \hat{H}' |-+\rangle &= -(-\mu_e + \mu_p) B |-+\rangle, \\ \hat{H}' |--\rangle &= (\mu_e + \mu_p) B |--\rangle.\end{aligned}\quad (10.28)$$

Смотрите, как удобно! Оператор \hat{H}' , действуя на каждое состояние, дает просто число, умноженное на это же состояние. В матрице $\langle i | H' | j \rangle$ есть поэтому только *диагональные* элементы, и можно просто добавить коэффициенты из (10.28) к соответствующим диагональным членам в (10.13), так что гамильтоновы уравнения (10.14) обращаются в

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{dC_1}{dt} &= \{A - (\mu_e + \mu_p) B\} C_1, \\ i\hbar \frac{dC_2}{dt} &= -\{A + (\mu_e - \mu_p) B\} C_2 + 2AC_3, \\ i\hbar \frac{dC_3}{dt} &= 2AC_2 - \{A - (\mu_e - \mu_p) B\} C_3, \\ i\hbar \frac{dC_4}{dt} &= \{A + (\mu_e + \mu_p) B\} C_4.\end{aligned}\quad (10.29)$$

Форма уравнений не изменилась, изменились только коэффициенты. И пока B не меняется со временем, можно все делать так же, как и раньше.

Подставляя $C_i = a_i e^{-(i/\hbar)Et}$, мы получаем

$$\begin{aligned}Ea_1 &= \{A - (\mu_e + \mu_p) B\} a_1, \\ Ea_2 &= -\{A + (\mu_e - \mu_p) B\} a_2 + 2Aa_3, \\ Ea_3 &= 2Aa_2 - \{A - (\mu_e - \mu_p) B\} a_3, \\ Ea_4 &= \{A + (\mu_e + \mu_p) B\} a_4.\end{aligned}\quad (10.30)$$

К счастью, первое и четвертое уравнения по-прежнему не зависят от остальных, так что снова пойдет в ход та же техника.

Одно решение — это состояние $|I\rangle$, для которого

$$a_1 = 1, \quad a_2 = a_3 = a_4 = 0,$$

или

$$|I\rangle = |I\rangle = |++\rangle \quad (10.31)$$

$$E_I = A - (\mu_e + \mu_p) B.$$

Другое решение

$$|II\rangle = |4\rangle = |--\rangle \quad (10.32)$$

$$E_{II} = A + (\mu_e + \mu_p) B.$$

Для остальных двух уравнений потребуется больше работы, потому что коэффициенты при a_2 и a_3 уже не равны друг другу. Но зато они очень похожи на ту пару уравнений, которую мы писали для молекулы аммиака. Оглядываясь на уравнения (7.20) и (7.21), можно провести следующую аналогию (помните, что тамошние индексы 1 и 2 соответствуют здесь индексам 2 и 3):

$$\begin{aligned} H_{11} &\rightarrow -A - (\mu_e - \mu_p) B, \\ H_{12} &\rightarrow 2A, \\ H_{21} &\rightarrow 2A, \\ H_{22} &\rightarrow -A + (\mu_e - \mu_p) B. \end{aligned} \quad (10.33)$$

Раньше энергии давались формулой (7.25), которая имела вид

$$E = \frac{H_{11} + H_{22}}{2} \pm \sqrt{\frac{(H_{11} - H_{22})^2}{4} + H_{12}H_{21}}. \quad (10.34)$$

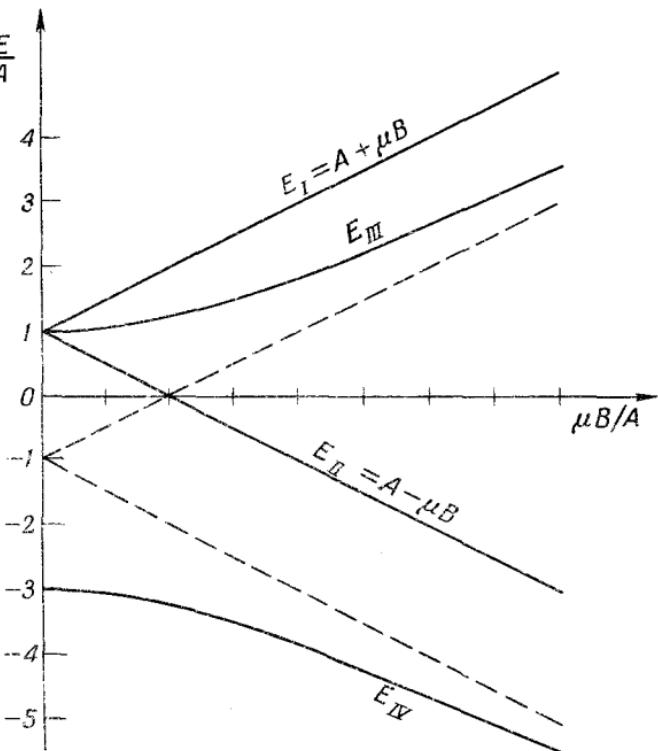
Подставляя сюда (10.33), получаем для энергии

$$E = -A \pm \sqrt{(\mu_e - \mu_p)^2 B^2 + 4A^2}.$$

В гл. 7 мы привыкли называть эти энергии E_I и E_{II} , теперь мы их обозначим E_{III} и E_{IV} :

$$\begin{aligned} E_{III} &= A \left\{ -1 + 2\sqrt{1 + (\mu_e - \mu_p)^2 B^2 / 4A^2} \right\}, \\ E_{IV} &= -A \left\{ 1 + 2\sqrt{1 + (\mu_e - \mu_p)^2 B^2 / 4A^2} \right\}. \end{aligned} \quad (10.35)$$

Итак, мы нашли энергии четырех стационарных состояний атома водорода в постоянном магнитном поле. Проверим наши выкладки, для чего устремим B к нулю и посмотрим, получатся ли те же энергии, что и в предыдущем параграфе. Вы видите, что все в порядке. При $B=0$ энергии E_I , E_{II} и E_{III} обращаются в $+A$, а E_{IV} — в $-3A$. Даже наша нумерация состояний согласуется с прежней. Но когда мы включим магнитное поле, то каждая энергия начнет меняться по-своему. Посмотрим, как это происходит.



Фиг. 10.3. Уровни энергии основного состояния водорода в магнитном поле B .

Кривые E_{III} и E_{IV} приближаются к пунктирным прямым $A \pm \mu' B$.

Во-первых, напомним, что у электрона μ_e отрицательно и почти в 1000 раз больше μ_p , которое положительно. Значит, и $\mu_e + \mu_p$, и $\mu_e - \mu_p$ оба отрицательны и почти равны друг другу. Обозначим их $-\mu$ и $-\mu'$:

$$\mu = -(\mu_e + \mu_p), \quad \mu' = -(\mu_e - \mu_p). \quad (10.36)$$

(И μ , и μ' положительны и по величине почти совпадают с μ_e , которое примерно равно одному магнетону Бора.) Наша четверка энергий тогда обратится в

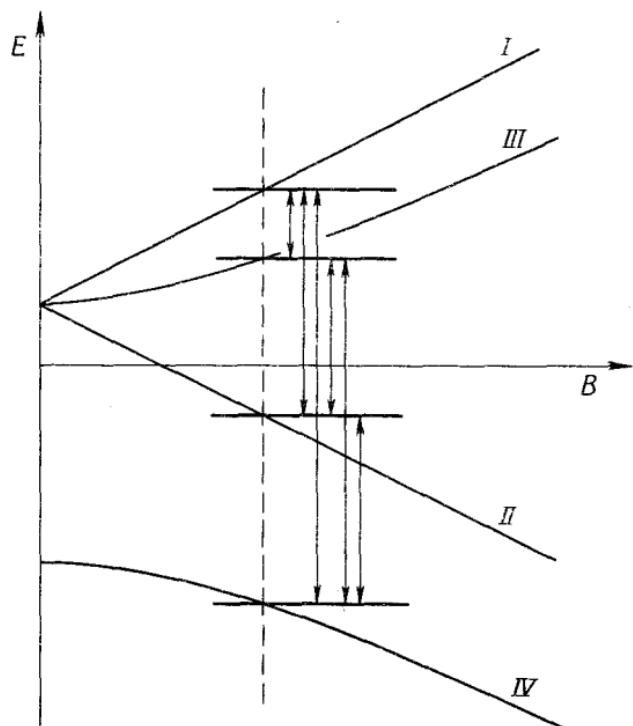
$$\begin{aligned} E_I &= A + \mu B, \\ E_{II} &= A - \mu B, \\ E_{III} &= A \left\{ 1 + 2 \sqrt{1 + \mu'^2 B^2 / 4A^2} \right\}, \\ E_{IV} &= -A \left\{ 1 + 2 \sqrt{1 + \mu'^2 B^2 / 4A^2} \right\}. \end{aligned} \quad (10.37)$$

Энергия E_I вначале равна A и линейно растет с ростом B со скоростью μ . Энергия E_{II} тоже вначале равна A , но с ростом B линейно *убывает*, наклон ее кривой равен $-\mu$. Изменение этих уровней с B показано на фиг. 10.3. На рисунке показаны также графики энергий E_{III} и E_{IV} . Их зависимость от B иная. При малых B они зависят от B квадратично; вначале наклон

их равен нулю, а затем они начинают искривляться и при больших B приближаются к прямым с наклоном $\pm\mu'$, близким к наклону E_1 и E_{11} .

Сдвиг уровней энергии атома, вызываемый действием магнитного поля, называется *эффектом Зеемана*. Мы говорим, что кривые на фиг. 10.3 показывают *зеемановское расщепление* основного состояния водорода. Когда магнитного поля нет, то просто получается одна спектральная линия от сверхтонкой структуры водорода. Переходы между состоянием $|IV\rangle$ и любым из остальных трех происходят с поглощением или испусканием фотона, частота которого равна $1420 \text{ M} \text{гц}$: $1/\hbar$, умноженной на разность энергий $4A$. Но когда атом находится в магнитном поле B , то линия получается гораздо больше. Могут происходить переходы между любыми двумя из четырех состояний. Значит, если мы имеем атомы во всех четырех состояниях, то энергия может поглощаться (или излучаться) в любом из шести переходов, показанных на фиг. 10.4 вертикальными стрелками. Многие из этих переходов можно наблюдать с помощью техники молекулярных пучков Раби, которую мы описывали в гл. 35, § 3 (вып. 7).

Что же является причиной переходов? Они возникают, если наряду с сильным постоянным полем B приложить малое воз-



Фиг. 10.4. Переходы между уровнями энергии основного состояния водорода в некотором магнитном поле B .

мущающее магнитное поле, которое меняется во времени. То же самое мы наблюдали и при действии переменного электрического поля на молекулу амиака. Только здесь виновник переходов — это магнитное поле, действующее на магнитные моменты. Но теоретические выкладки те же самые, что и в случае амиака. Проще всего они получаются, если взять возмущающее магнитное поле, врачающееся в плоскости xy , хотя то же будет от любого осциллирующего горизонтального поля. Если вы вставите это возмущающее поле в качестве добавочного члена в гамильтониан, то получите решения, в которых амплитуды меняются во времени, как это было и с молекулой амиака. Значит, вы сможете легко и аккуратно рассчитать вероятность перехода из одного состояния в другое. И обнаружите, что все это согласуется с опытом.

§ 5. Состояния в магнитном поле

Теперь займемся формой кривых на фиг. 10.3. Во-первых, если говорить о больших полях, то зависимость энергии от поля довольно интересна и легко объяснима. При достаточно больших B (а именно при $\mu B/A \gg 1$) в формулах (10.37) можно пренебречь единицей. Четверка энергий принимает вид

$$\begin{aligned} E_I &= A + \mu B, & E_{II} &= A - \mu B, \\ E_{III} &= -A + \mu' B, & E_{IV} &= -A - \mu' B. \end{aligned} \quad (10.38)$$

Это уравнения четырех прямых на фиг. 10.3. Эти формулы можно физически понять следующим образом. Природа стационарных состояний в нулевом поле полностью определяется взаимодействием двух магнитных моментов. Перемешивание базисных состояний $|+-\rangle$ и $|--\rangle$ в стационарных состояниях $|III\rangle$ и $|IV\rangle$ вызвано этим взаимодействием. Однако вряд ли можно ожидать, что каждая из наших частиц (и протон, и электрон) в сильных внешних полях будет испытывать влияние поля другой частицы; каждая будет действовать так, как если бы во внешнем поле находилась она одна. Тогда (как мы уже много раз видели) спин электрона окажется направленным вдоль внешнего магнитного поля (по нему или против него).

Пусть спин электрона направлен вверх, т. е. вдоль поля; энергия его будет $-\mu_e B$. Протон при этом может стоять по-разному. Если у него спин тоже направлен вверх, то его энергия $-\mu_p B$. Их сумма равна $-(\mu_e + \mu_p) B = \mu B$. А это как раз и есть E_I , и это очень приятно, потому что мы описываем состояние $|++\rangle = |I\rangle$. Есть еще небольшой дополнительный член A (теперь $\mu B \gg A$), представляющий энергию взаимодействия протона и электрона, когда их спины параллельны. (Мы с самого начала считали A положительным, потому что так должно было быть по теории, о которой шла речь; то же получается и на

опыте.) Но спин протона может быть направлен и вниз. Тогда его энергия во внешнем поле обратится в $+\mu_p B$, а вместе с электроном их энергия будет $-(\mu_e - \mu_p) B = -\mu B$. А энергия взаимодействия обращается в $-A$. Их сумма даст энергию E_{III} в (10.38). Так что состояние $|III\rangle$ в сильных полях становится состоянием $|+-\rangle$.

Пусть теперь спин электрона направлен вниз. Его энергия во внешнем поле равна $\mu_e B$. Если и протон смотрит вниз, то их общая энергия равна $(\mu_e + \mu_p) B = -\mu B$ плюс энергия взаимодействия A (спины-то теперь параллельны). Это приводит как раз к энергии E_{II} в (10.38) и соответствует состоянию $|--\rangle = |II\rangle$, что очень мило. И наконец, если у электрона спин направлен вниз, а у протона — вверх, то мы получим энергию $(\mu_e - \mu_p) B - A$ (минус A потому, что спины противоположны), т. е. E_{IV} . А состояние отвечает $|--+\rangle$.

«Погодите минутку, — вероятно, скажете вы. — «Состояния $|III\rangle$ и $|IV\rangle$ — это не состояния $|+-\rangle$ и $|--+\rangle$; они являются их смесями». Верно, но перемешивание здесь едва заметно. Действительно, при $B=0$ они являются смесями, но мы пока не выясняли, что бывает при больших B . Когда мы для получения энергии стационарных состояний пользовались аналогией между (10.33) и формулами гл. 7, то заодно можно было оттуда взять и амплитуды. Они получатся из (7.23):

$$\frac{a_2}{a_3} = \frac{E - H_{22}}{H_{11}}.$$

Отношение a_2/a_3 — это, конечно, на сей раз C_2/C_3 . Вставляя аналогичные величины из (10.33), получаем

$$\frac{C_2}{C_3} = \frac{E + A - (\mu_e - \mu_p) B}{2A},$$

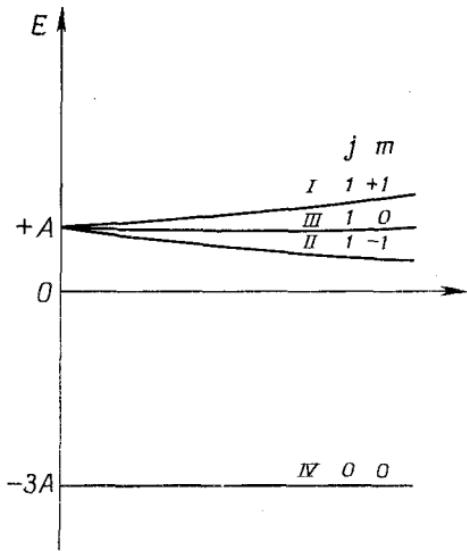
или

$$\frac{C_2}{C_3} = \frac{E + A + \mu' B}{2A}, \quad (10.39)$$

где вместо E надо взять подходящую энергию (либо E_{III} , либо E_{IV}). Например, для состояния $|III\rangle$ имеем

$$\left(\frac{C_2}{C_3}\right)_{III} \approx \frac{\mu' B}{A}. \quad (10.40)$$

Значит, при больших B у состояния $|III\rangle$ $C_2 \gg C_3$; состояние почти полностью становится состоянием $|2\rangle = |+-\rangle$. Точно так же если в (10.39) подставить E_{IV} , то получится, что $(C_2/C_3)_{IV} \ll 1$; в сильных полях состояние $|IV\rangle$ обращается попросту в состояние $|3\rangle = |--+\rangle$. Вы видите, что коэффициенты в линейных комбинациях наших базисных состояний, составляющих стационарные состояния, сами зависят от B .



Фиг. 10.5. Состояния атома водорода в слабых магнитных полях.

Состояние, которое мы имеем $|III\rangle$, в очень слабых полях представляет собой смесь $|+-\rangle$ и $|--+\rangle$ в пропорции $1:1$, но в сильных полях целиком смещается к $|+-\rangle$. Точно так же и состояние $|IV\rangle$, которое в слабых полях также является

смесью $|+-\rangle$ и $|--+\rangle$ в пропорции $1:1$ (с обратным знаком), переходит в состояние $|--+\rangle$, когда спины из-за сильного внешнего поля больше друг с другом не связаны.

Хотелось бы обратить ваше внимание, в частности, на то, что происходит в очень слабых магнитных полях. Имеется одна энергия ($-3A$), которая не изменяется при включении слабого магнитного поля. И имеется другая энергия ($+A$), которая при включении слабого магнитного поля расщепляется на три различных уровня энергии. В слабых полях энергии с ростом B меняются так, как показано на фиг. 10.5. Допустим, что у нас есть каким-то образом отобранное множество атомов водорода, у которых у всех энергия равна $-3A$. Если пропустить их через прибор Штерна — Герлаха (с не очень сильными полями), то мы найдем, что они просто проходят целиком насквозь. (Поскольку их энергия не зависит от B , то, согласно принципу виртуальной работы, градиент магнитного поля не создает никакой силы, которая бы ощущалась ими.) Пусть, с другой стороны, мы бы отобрали группу атомов с энергией $+A$ и пропустили их через прибор Штерна — Герлаха, скажем через прибор S . (Опять поля в приборе не должны быть столь сильными, чтобы разрушить внутренность атома; подразумевается, что поля малы настолько, что энергии можно считать линейно зависящими от B .) Мы бы получили *три пучка*. На состояния $|I\rangle$ и $|II\rangle$ действуют противоположные силы, их энергии меняются по B линейно с наклоном $\pm \mu$, так что силы сходны с силами, действующими на диполь, у которого $\mu_z = \mp \mu$, а состояние $|III\rangle$ проходит насквозь. Мы опять возвращаемся к гл. 3. Атом водорода с энергией $+A$ — это частица со спином 1. Это энергетическое состояние является «частицей», для которой

$j=1$, и может быть описано (по отношению к некоторой системе осей в пространстве) в терминах базисных состояний $|+S\rangle$, $|0S\rangle$ и $| - S \rangle$, которыми мы пользовались в гл. 3. С другой стороны, когда атом водорода имеет энергию $-3A$, он является частицей со спином нуль. (Напоминаем, что все сказанное, строго говоря, справедливо лишь для бесконечно малых магнитных полей.) Итак, состояния водорода в нулевом магнитном поле можно сгруппировать следующим образом:

$$\left. \begin{array}{l} |I\rangle = |++\rangle \\ |III\rangle = \frac{|+-\rangle + |-+\rangle}{\sqrt{2}} \\ |II\rangle = |--\rangle \\ |IV\rangle = \frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{\sqrt{2}} \end{array} \right\} \text{спин 1} \quad \left. \begin{array}{l} |+S\rangle, \\ |0S\rangle, \\ |-S\rangle, \end{array} \right\} \quad (10.41)$$

$$\left. \begin{array}{l} |I\rangle = |++\rangle \\ |III\rangle = \frac{|+-\rangle + |-+\rangle}{\sqrt{2}} \\ |II\rangle = |--\rangle \\ |IV\rangle = \frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{\sqrt{2}} \end{array} \right\} \text{спин 0}. \quad (10.42)$$

В гл. 35 (вып. 7) мы говорили, что у всякой частицы компоненты момента количества движения вдоль любой оси могут принимать только определенные значения, всегда отличающиеся на \hbar . Так, z -компоненты момента количества движения J_z может быть равна $j\hbar$, $(j-1)\hbar$, $(j-2)\hbar$, ..., $(-j)\hbar$, где j — спин частицы (который может быть целым или полуцелым). Обыкновенно пишут

$$J_z = m\hbar, \quad (10.43)$$

где m стоит вместо любого из чисел j , $j-1$, $j-2$, ..., $-j$ (в свое время мы не сказали об этом). Вы поэтому часто встретите в книжках нумерацию четырех основных состояний при помощи так называемых *квантовых чисел* j и m [часто именуемых «квантовым числом полного момента количества движения» (j) и «магнитным квантовым числом» (m)]. Вместо наших символов состояний $|I\rangle$, $|II\rangle$ и т. д. многие часто пишут состояния в виде $|j, m\rangle$. Нашу табличку состояний для нулевого поля в (10.41) и (10.42) они бы изобразили в виде табл. 10.3. Здесь нет какой-либо новой физики, это просто вопрос обозначений.

Таблица 10.3 • СОСТОЯНИЯ АТОМА ВОДОРОДА В НУЛЕВОМ ПОЛЕ

Состояние $ j, m\rangle$	j	m	Наше обозначение
$ 1, +1\rangle$	1	+1	$ I\rangle = +S\rangle$
$ 1, 0\rangle$	1	0	$ III\rangle = 0S\rangle$
$ 1, -1\rangle$	1	-1	$ II\rangle = -S\rangle$
$ 0, 0\rangle$	0	0	$ IV\rangle$

§ 6. Проекционная матрица для спина 1*

Теперь мы хотели бы применить наши знания об атоме водорода к одной специальной задаче. В гл. 3 мы говорили о том, что частица со спином 1, находящаяся в одном из базисных состояний $(+, 0, -)$ по отношению к прибору Штерна — Герлаха с какой-то частной ориентацией (скажем, по отношению к прибору S), будет иметь определенную амплитуду пребывания в одном из трех состояний по отношению к прибору T , ориентированному в пространстве по-другому. Имеются девять таких амплитуд $\langle jT | iS \rangle$, которые вместе образуют проекционную матрицу. В гл. 3, § 7, мы без доказательства выписали элементы этой матрицы для различных ориентаций T по отношению к S . Теперь мы хотим показать вам один из способов их вывода.

В атоме водорода мы с вами отыскали систему со спином 1, составленную из двух частиц со спином $1/2$. В гл. 4 мы уже научились преобразовывать амплитуды для спина $1/2$. Эти знания можно применить к тому, чтобы получить преобразование для спина 1. Вот как это делается: имеется система (атом водорода с энергией $+A$) со спином 1. Пусть мы пропустили ее сквозь фильтр S Штерна — Герлаха так, что знаем теперь, что она находится в одном из базисных состояний по отношению к S , скажем в $| +S \rangle$. Какова амплитуда того, что она окажется в одном из базисных состояний, скажем $| +T \rangle$, по отношению к прибору T ? Если вы назовете систему координат прибора S системой x, y, z , то состояние $| +S \rangle$ — это то, что недавно называлось состоянием $| + + \rangle$. Но представьте, что какой-то ваш приятель провел свою ось z вдоль оси T . Он свои состояния будет относить к некоторой системе x', y', z' . Его состояния «вверх» и «вниз» для электрона и протона отличались бы от ваших. Его состояние «плюс — плюс», которое можно записать $| +'+' \rangle$, отмечая «штрихованность» системы, есть состояние $| +T \rangle$ частицы со спином 1. А вас интересует $\langle +T | +S \rangle$, что есть просто иной способ записи амплитуды $\langle +'+' | + + \rangle$.

Амплитуду $\langle +'+' | + + \rangle$ можно найти следующим образом. В вашей системе спин *электрона* из состояния $| + + \rangle$ направлен вверх. Это означает, что у него есть некоторая амплитуда $\langle +' | + \rangle_e$ оказаться в системе вашего приятеля спином вверх и некоторая амплитуда $\langle -' | + \rangle_e$ оказаться в этой системе спином вниз. Равным образом, *протон* в состоянии $| + + \rangle$ имеет спин вверх в вашей системе и амплитуды $\langle +' | + \rangle_p$ и $\langle -' | + \rangle_p$ оказываются спином вверх или вниз в «штрихованной» системе. Поскольку мы говорим о двух разных частицах, то амплитуда того, что *обе* частицы *вместе* в его

* Тем, кто перескочил через гл. 4, придется пропустить и этот параграф.

системе окажутся спинами вверх, равна произведению амплитуд

$$\langle +'+'|++\rangle = \langle +'|+\rangle_e \langle +'|+\rangle_p. \quad (10.44)$$

Мы поставили значки *e* и *p* под амплитудами $\langle +'|+\rangle$, чтобы было ясно, что мы делаем. Но обе они — это просто амплитуды преобразований для частицы со спином $1/2$, так что на самом деле — это одни и те же числа. Фактически — это те же амплитуды, которые мы в гл. 4 называли $\langle +T|+S\rangle$ и которые мы привели в табл. 4.1 и 4.2.

Но теперь, однако, нам угрожает путаница в обозначениях. Надо уметь различать амплитуду $\langle +T|+S\rangle$ для частицы со спином $1/2$ от того, что мы *также* назвали $\langle +T|+S\rangle$, но для спина 1 — между ними нет ничего общего! Надеюсь, вас не очень собьет с толку, если мы *на время* введем иные обозначения амплитуд для спина $1/2$. Они приведены в табл. 10.4. Для состояний частиц спина 1 мы по-прежнему будем прибегать к обозначениям $|+S\rangle$, $|0S\rangle$ и $| -S\rangle$.

Таблица 10.4 • АМПЛИТУДЫ ДЛЯ СПИНА $1/2$

Обозначения, принятые в этой главе	Обозначения, принятые в гл. 4
$a = \langle +' +\rangle$	$\langle +T +S\rangle$
$b = \langle -' +\rangle$	$\langle -T +S\rangle$
$c = \langle +' - \rangle$	$\langle +T -S\rangle$
$d = \langle -' - \rangle$	$\langle -T -S\rangle$

В наших новых обозначениях (10.44) просто превращается в

$$\langle +'+'|++\rangle = a^2.$$

Это как раз амплитуда $\langle +T|+S\rangle$ для спина 1. Теперь давайте, например, предположим, что у вашего приятеля система координат, т. е. «штрихованный» прибор *T*, повернута вокруг *ваших* осей *z* на угол φ ; тогда из табл. 4.2 получается

$$a = \langle +'|+\rangle = e^{i\varphi/2}.$$

Значит, из (10.44) амплитуда для спина 1 окажется равной

$$\langle +T|+S\rangle = \langle +'+'|++\rangle = (e^{i\varphi/2})^2 = e^{i\varphi}. \quad (10.45)$$

Теперь вам понятно, как мы будем действовать дальше.

Но хорошо бы провести выкладки в общем случае для всех состояний. Если протон и электрон в *нашей* системе (системе *S*) оба смотрят вверх, то амплитуды того, что в другой системе (системе *T*) они будут в одном из четырех возможных состояний,

равны

$$\begin{aligned}\langle +'+'|++\rangle &= \langle +'|+\rangle_e \langle +'|+\rangle_p = a^2, \\ \langle +'-'|++\rangle &= \langle +'|+\rangle_e \langle -'|+\rangle_p = ab, \\ \langle -'+'|++\rangle &= \langle -'|+\rangle_e \langle +'|+\rangle_p = ba, \\ \langle -'-'|++\rangle &= \langle -'|+\rangle_e \langle -'|+\rangle_p = b^2.\end{aligned}\quad (10.46)$$

Затем мы можем записать состояние $|++\rangle$ в виде следующей линейной комбинации:

$$|++\rangle = a^2 |+'+'\rangle + ab \{|+'-\rangle + |-'+'\rangle\} + b^2 |-'-\rangle. \quad (10.47)$$

Но теперь мы замечаем, что $|+'+'\rangle$ — это состояние $|+T\rangle$, что $\{|+'-\rangle + |-'+'\rangle\}$ — это как раз $\sqrt{2}$, умноженный на состояние $|0T\rangle$ [см. (10.41)], и что $|-'-\rangle = |-T\rangle$. Иными словами, (10.47) переписывается в виде

$$|+S\rangle = a^2 |+T\rangle + \sqrt{2} ab |0T\rangle + b^2 |-T\rangle. \quad (10.48)$$

Точно так же легко показать, что

$$|-S\rangle = c^2 |+T\rangle + \sqrt{2} cd |0T\rangle + d^2 |-T\rangle. \quad (10.49)$$

С $|0S\rangle$ дело обстоит чуть посложнее, потому что

$$|0S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{|+-\rangle + |-+\rangle\}.$$

Но каждое из состояний $|+-\rangle$ и $|-+\rangle$ можно выразить через «штрихованные» состояния и подставить в сумму:

$$\begin{aligned}|+-\rangle &= \\ &= ac |+'+'\rangle + ad |+'-\rangle + bc |-'+'\rangle + bd |-'-\rangle\end{aligned}\quad (10.50)$$

и

$$\begin{aligned}|-+\rangle &= \\ &= ac |+'+'\rangle + bc |+'-\rangle + ad |-'+'\rangle + bd |-'-\rangle.\end{aligned}\quad (10.51)$$

Умножая сумму (10.50) и (10.51) на $1/\sqrt{2}$, получаем

$$\begin{aligned}|0S\rangle &= \frac{2}{\sqrt{2}} ac |+'+'\rangle + \frac{ad+bc}{\sqrt{2}} \{|+'-\rangle + |-'+'\rangle\} + \\ &\quad + \frac{2}{\sqrt{2}} bd |-'-\rangle.\end{aligned}$$

Отсюда следует

$$|0S\rangle = \sqrt{2} ac |+T\rangle + (ad+bc) |0T\rangle + \sqrt{2} bd |-T\rangle. \quad (10.52)$$

Теперь у нас есть все необходимые амплитуды. Коэффициенты в (10.48), (10.49) и (10.52) — это матричные элементы

$\langle iT | iS \rangle$. Сведем их в одну матрицу:

$$\langle iT | iS \rangle = \begin{array}{c} \xrightarrow{iS} \\ \xleftarrow{iT} \end{array} \begin{pmatrix} a^2 & \sqrt{2}ac & c^2 \\ \sqrt{2}ab & ad + bc & \sqrt{2}cd \\ b^2 & \sqrt{2}bd & d^2 \end{pmatrix}, \quad (10.53)$$

Мы выразили преобразование спина 1 через амплитуды a, b, c и d преобразования спина $1/2$.

Если, например, система T повернута по отношению к S на угол α вокруг оси y (см. фиг. 3.6, стр. 64), то амплитуды в табл. 10.4 — это просто матричные элементы $R_y(\alpha)$ в табл. 4.2:

$$\begin{aligned} a &= \cos \frac{\alpha}{2}, & b &= -\sin \frac{\alpha}{2}, \\ c &= \sin \frac{\alpha}{2}, & d &= \cos \frac{\alpha}{2}. \end{aligned} \quad (10.54)$$

Подставив их в (10.53), получим формулы (3.38), которые приведены на стр. 80 без доказательства.

Но что же случилось с состоянием $|IV\rangle$?! Это система со спином нуль; значит, у нее есть только одно состояние — оно во всех системах координат одно и то же. Можно проверить, что все так и выходит, если взять разность (10.50) и (10.51); получим

$$|+-\rangle - |-+\rangle = (ad - bc) \{ |+'-\rangle - |-'+\rangle \}.$$

Но $(ad - bc)$ — это определитель матрицы для спина $1/2$, он просто равен единице. Получается

$$|IV'\rangle = |IV\rangle$$

при любой относительной ориентации двух систем координат.