

§ 85. Понятие о дисперсионной формуле квантовой механики

1. Классическая дисперсионная формула (84.10) для газов с большой точностью описывает фактически наблюдаемый ход показателя преломления вблизи отдельных линий поглощения ω_k , но лишь при том условии, если коэффициенты N_k , а также собственные частоты ω_k и коэффициенты затухания γ_k рассматриваются как *эмпирические постоянные, определяемые из самой кривой дисперсии и фактического положения спектральных линий в спектре излучения или поглощения вещества*. В частности, для согласования с опытом оказалось необходимым в этой формуле величины N_k заменить на $f_k N_k$, где f_k — постоянные коэффициенты, меньшие единицы, называемые *силами осцилляторов*.

Теорию дисперсии в квантовой механике можно строить по той же схеме, что и в классической физике. Задача сводится к вычислению *поляризуемости атомов и молекул* в электрическом поле световой волны. Но при решении этой задачи надо пользоваться не классическими, а *квантомеханическими* уравнениями движения, например, в форме *волнового уравнения Шредингера* (1887—1961). Поскольку в данной книге квантовая механика не предполагается известной, систематическое изложение квантовой теории дисперсии в ней невозможно. Можно дать только общую характеристику и некоторые результаты этой теории.

2. Квантовая теория дисперсии (и в этом одно из преимуществ ее перед классической) не пользуется моделью квазиупруго связанного электрона и не вводит никаких в действительности не существующих сил. Квантовая механика объясняет строение и устойчивость атомных систем с помощью *одних только электрических сил*. Для простоты будем предполагать, что в атоме есть всего только один *валентный электрон*, определяющий его химические и оптические свойства. Остальные электроны прочно удерживаются на внутренних оболочках, обладая значительно большими энергиями связи. Состояния таких электронов практически не возмущаются слабым электрическим полем световой волны. Их роль сводится только к изменению электрического поля атомного ядра, в котором движется валентный электрон. Именно по этой причине атом может рассматриваться как *одноэлектронный*. Такая модель атома весьма близко соответствует действительности.

В отсутствие внешних полей атом может находиться только во вполне определенных *стационарных состояниях*, в которых его энергия может принимать также вполне определенные дискретные значения W_1, W_2, W_3, \dots (*уровни энергии*). Их принято нумеровать в порядке возрастания энергии. При переходе атома с высшего энергетического уровня k на более низкий уровень n происходит излучение света с испусканием кванта энергии

$$\hbar\omega_{kn} \equiv h\nu_{kn} = W_k - W_n. \quad (85.1)$$

При обратном переходе атома с низшего энергетического уровня n на более высокий уровень k происходит возбуждение атома с поглощением такого же кванта. Таким образом, в отличие от классического гармонического осциллятора, атом, даже если он одноэлектронный, излучает не одну частоту ω_0 , а целый спектр частот ω_{kn} , которые в квантовой теории дисперсии и играют роль собственных частот атома. Если переход происходит с более низкого уровня k на более высокий уровень n (поглощение), то для сохранения без изменения соотношения (84.10) удобно ввести *отрицательные частоты* ω_{kn} . Если нет внешних возмущений (отсутствие силовых полей, невысокие температуры), то в результате процессов излучения все атомы перейдут на *нижний* или *основной* энергетический уровень, т. е. в так называемое *основное* или *нормальное состояние*. На основном уровне изолированный атом будет находиться неограниченно долго, пока в результате внешнего воздействия он не перейдет на другой уровень.

При включении внешнего поля атом выйдет из исходного основного стационарного состояния. Возникшее состояние, согласно квантовой механике, можно характеризовать как суперпозицию стационарных состояний, каждому из которых приписывается определенная вероятность. Если электрическое поле слабое и гармонически меняется во времени с частотой ω , то эти вероятности также будут меняться во времени с той же частотой. Появится переменный дипольный момент атома, индуцированный электрическим полем световой волны. Его можно представить в виде $\mathbf{p} = \beta \mathbf{E}$. В общем случае поляризуемость атома β есть *тензор*, но мы ограничимся простейшим случаем, когда он *скаляр*. Если не учитывать поглощения (что допустимо вдали от собственных частот ω_{nk}), то квантовая механика приводит к результату

$$\beta = \frac{e^2}{m} \sum_k \frac{f_{nk}}{\omega_{nk}^2 - \omega^2}, \quad (85.2)$$

где f_{nk} — постоянные. Формула предполагает, что до включения электрического поля атом находился в стационарном состоянии n . Суммирование ведется по всем возможным значениям k , как большим, так и меньшим n .

Для выяснения физического смысла постоянных f_{nk} заметим, что существует определенная вероятность, что за определенное время (например, равное единице) атом в отсутствие внешних полей *самопроизвольно* перейдет из высшего стационарного состояния k в более низкое стационарное состояние n . Постоянная f_{nk} пропорциональна этой вероятности. Самопроизвольный переход из низшего состояния n в высшее состояние k , конечно, невозможен. В этом случае f_{kn} определяется соотношением $f_{kn} = -f_{nk}$. Следовательно, при $n = k$ величины f_{nk} равны нулю, так что суммирование в (85.2)

производится только по $k \neq n$. Величина f_{nk} и называется *силой осциллятора с частотой ω_{nk}* .

Используя выражения (85.2), приходим к следующей дисперсионной формуле для атомов с одним валентным электроном:

$$n^2 = 1 + 4\pi N \frac{e^2}{m} \sum_{k \neq n} \frac{f_{nk}}{\omega_{nk}^2 - \omega^2}. \quad (85.3)$$

Сравнение этой формулы с классической формулой (84.10) (без учета поглощения) приводит к следующей наглядной аналогии. Все атомы, находящиеся в одном и том же исходном состоянии n , как бы разбиваются на группы, нумеруемые индексом k . Атомы одной и той же группы ведут себя как *классические гармонические осцилляторы* с собственной частотой ω_{nk} . Если $k > n$, то частота ω_{nk} считается *положительной*, а при $k < n$ — *отрицательной*. Число атомов k -й группы в единице объема определяется выражением $N_k = f_{nk}N$. Так как $\sum N_k = N$, то должно быть

$$\sum_k f_{nk} = 1. \quad (85.4)$$

Если в атоме Z валентных электронов, то это соотношение переходит в

$$\sum_k f_{nk} = Z. \quad (85.5)$$

Полученные формулы выражают так называемое *правило сумм*, найденное независимо друг от друга Томасом и Рейхе, с одной стороны, и Куном, с другой (1925 г.). Приведенные наводящие рассуждения не могут служить доказательством формул (85.4) и (85.5). Это видно уже из того, что при $k < n$ силы осцилляторов f_{nk} , а потому и числа атомов N_k отрицательны. Однако сами формулы (85.4) и (85.5) могут быть строго доказаны методами квантовой механики.

3. Если до включения электрического поля атомы газа не находились в одном и том же стационарном состоянии, а были распределены по таким состояниям, то формулу (85.3) следует заменить на

$$n^2 = 1 + 4\pi N \frac{e^2}{m} \sum_n \sum_k \frac{f_{nk}}{\omega_{nk}^2 - \omega^2}. \quad (85.6)$$

Таким же путем должны быть обобщены и правила сумм (85.4) и (85.5) — в них суммирование надо производить не только по всем значениям k , но и по всем значениям n .

Принципиально новое явление, предсказанное квантовой механикой, состоит в том, что в формулу (85.6) могут входить слагаемые не только с положительными f_{nk} (когда $k > n$), но и с отрицательными (когда $k < n$). Так как $\omega_{nk}^2 = \omega_{kn}^2$, то в дисперсионную формулу войдут только суммы $(f_{nk} + f_{kn})$, а не каждое слагаемое в отдельности. Если на нижнем энергетическом уровне находится больше атомов, чем на верхнем, то $(f_{nk} + f_{kn}) > 0$, в противоположном случае $(f_{nk} + f_{kn}) < 0$. В первом случае собственная частота $|\omega_{nk}|$ внесет в дисперсионную формулу (85.6) слагаемое того же знака, что и в классическую формулу, во втором — противоположного.

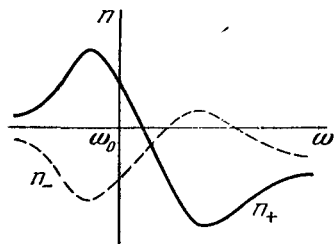


Рис. 300.

В соответствии с этим различают *положительную* и *отрицательную дисперсию*. Ход показателя преломления $n(\omega)$ вблизи собственной частоты $\omega_0 = |\omega_{nk}|$ в обоих случаях представлен схематически на рис. 300 (n_+ для положительной, n_- для отрицательной дисперсии). Что касается коэффициента затухания γ , то в случае отрицательной дисперсии он также *отрицателен*, т. е. при распространении света имеет место его *усиление*, а не ослабление. Это происходит, конечно, за счет переходов атомов с более высокого энергетического уровня на более низкий с испусканием квантов света (индуцированное излучение, см. § 119).

В обычных условиях до включения внешнего поля атомы среды находятся на самом низком — основном — энергетическом уровне. В этом случае световая волна будет переводить атомы только на более высокие уровни, так что все f_{nk} окажутся положительными. То же самое будет происходить и при тепловом возбуждении в случае термодинамического равновесия, так как, в соответствии с формулой Больцмана, число атомов в исходном состоянии будет убывать с возрастанием номера энергетического уровня. Однако, применяя нетепловые методы возбуждения, например пропуская через вещество сильные электрические токи, можно создавать *термодинамически неравновесные* метастабильные состояния вещества с *инверсной заселенностью энергетических уровней*, как это в действительности и делается в лазерах. Под инверсной заселенностью двух различных энергетических уровней понимают такое состояние, когда на верхнем уровне находится больше атомов, чем на нижнем. В этом случае можно получать и действительно получают среду с отрицательной дисперсией. Влияние отрицательных слагаемых в дисперсионной формуле впервые (1930 г.) наблюдал Ладенбург в газе при прохождении через него сильного электрического разряда, хотя дисперсия в целом в его опытах и оставалась положительной.