

З. ФЛЮГГЕ

Задачи по квантовой механике

том 2

Перевод с английского
кандидата физ.-мат. наук, доцента
Б. А. ЛЫСОВА

Под редакцией
доктора физ.-мат. наук, профессора
А. А. СОКОЛОВА

Издательство «Мир»
МОСКВА 1974

DIE GRUNDLEHREN DER
MATHEMATISCHEN WISSENSCHAFTEN

in Einzeldarstellungen
mit besonderer Berücksichtigung
der Anwendungsgebiete
Band 178

**Practical
Quantum Mechanics II**

by

SIEGFRIED FLÜGGE

Physikalisches Institut
der Universität Freiburg

SPRINGER-VERLAG
BERLIN — HEIDELBERG — NEW YORK
1971

Книга Флюгге представляет собой своеобразное изложение квантовой механики на базе анализа задач и примеров. Она охватывает почти все разделы квантовой механики, нашедшие большое практическое применение. Внимательно читая книгу Флюгге, можно не только изучить основы квантовой механики, но и научиться применять ее к конкретным задачам.

Книга разделена на два тома. Второй том состоит из пяти глав (III—VII). Гл. III посвящена движению как одной (часть А), так и нескольких (часть Б) нерелятивистских частиц со спином $1/2$. Глава IV по существу представляет собой дальнейшее развитие гл. III. В ней исследуется движение очень большого числа частиц (электронный газ в металле, модель атома Томаса—Ферми и т. д.). В гл. V вошли нестационарные задачи, в гл. VI—задачи и примеры, связанные с релятивистским уравнением Дирака, а в последнюю, гл. VII—элементы теории вторичного квантования, включая квантовую теорию излучения. Книга снабжена математическим приложением, которое посвящено специальным функциям и некоторым интегралам, часто встречающимся в квантовой механике.

Книга полезна студентам и преподавателям, а также широкому кругу физиков-экспериментаторов, не обладающих достаточным опытом выполнения конкретных квантовомеханических расчетов.

Редакция литературы по физике

Содержание

III. Частицы со спином

А. Одночастичные задачи	9
129. Явный вид матриц Паули	9
130. Собственные векторы матриц Паули	11
131. Алгебра спиновых матриц	14
132. Трансформационные свойства спиноров	16
133. Электрон со спином в центральном поле	18
134. Квадрупольный момент при наличии спина	22
135. Среднее значение магнитного момента	24
136. Тонкая структура	27
137. Плоские волны для частиц со спином $1/2$	29
138. Спиновый резонанс для свободного электрона	32
Б. Двух- и трехчастичные задачи	34
139. Спиновые функции двух частиц	34
140. Центральное взаимодействие между нуклонами, зависящее от спина	36
141. Степени спиновых операторов	38
142. Собственные функции оператора полного момента двух частиц, обладающих спином	39
143. Тензорные силы	41
144. Дейтрон с тензорным взаимодействием	44
145. Электрический квадрупольный и магнитный дипольный моменты дейтрона	47
146. Спиновые функции трех частиц	50
147. Рассеяние нейтронов молекулярным водородом	53

IV. Многочастичные задачи

А. Малое число частиц	57
148. Две отталкивающиеся частицы на окружности	57
149. Трехатомная линейная молекула	61
150. Движение центра масс	66
151. Теорема вириала	69
152. Определитель Слэтера	70
153. Определитель Слэтера и обменное взаимодействие	72
154. Два атомных электрона в основном состоянии	74
155. Возбужденные состояния атома гелия	77
156. Возбужденные S-состояния атома гелия	81
157. Основное состояние атома лития	85

158. Обменные поправки к основному состоянию атома лития . . .	88
159. Электрическая восприимчивость	91
160. Диамагнитная восприимчивость неона	94
161. Силы Ван-дер-Ваальса	95
162. Обменное вырождение при наличии возбуждения	97
163. Нейтральная молекула водорода	101
164. Рассеяние одинаковых частиц	106
165. Аномальное рассеяние протонов на протонах	110
166. Неупругое рассеяние	113

Б. Очень большое число частиц. Квантовая статистика

167. Электронный газ в металле	119
168. Парамагнитная восприимчивость металла	122
169. Холодная эмиссия без учета сил электростатического изображения	125
170. Холодная эмиссия с учетом сил электростатического изображения	128
171. Белый карлик	133
172. Приближение Томаса—Ферми	138
173. Поправка Амальди для нейтрального атома	143
174. Энергия атома в модели Томаса—Ферми	144
175. Теорема вириала для модели атома Томаса—Ферми	149
176. Приближение Тейтца для модели атома Томаса—Ферми	150
177. Вариационный метод для модели атома Томаса—Ферми	152
178. Влияние экранировки на K -электроны	153

V. Нестационарные задачи

179. Двухуровневая система под действием не зависящего от времени возмущения	158
180. Действие периодического возмущения на двухуровневую систему	160
181. Теория возмущений Дирака	164
182. Периодическое возмущение и резонанс	166
183. Золотое правило для рассеяния	168
184. Борновское рассеяние в импульсном представлении	171
185. Кулоновское возбуждение атома	173
186. Фотоэффект	177
187. Дисперсия света. Силы осцилляторов	180
188. Спин-флип в магнитной резонансной системе	184

VI. Релятивистское уравнение Дирака

189. Квадрирование уравнения Дирака	188
190. Плоские волны Дирака с положительной энергией	190
191. Трансформационные свойства дираковских спиноров	194
192. Лоренцевы коварианты	195
193. Пространственная инверсия	199
194. Зарядовое сопряжение	201
195. Состояния со смешанной спиральностью	203
196. Среднее значение спина	205
197. Алгебраические свойства волнового спинора Дирака	206
198. Плотность тока в алгебраической формулировке	209

199. Ток проводимости и ток поляризации	211
200. Уравнение Дирака в двухкомпонентной записи	214
201. Центральные силы в теории Дирака	217
202. Проблема Кеплера в теории Дирака	221
203. Тонкая структура энергетических уровней атома водорода	225
204. Проблема Кеплера. Радиальные функции при положительных энергиях	230
205. Разложение дираковской плоской волны по состояниям с определенным моментом	234
206. Рассеяние в поле центральных сил	237
207. Гладкая потенциальная ступенька	240
208. Наклонное падение плоской волны на прямоугольную потенциальную ступеньку	247
209. Отражение от прямоугольной потенциальной ступеньки при наклонном падении	251

VII. Теория излучения

210. Квантование шредингеровского волнового поля	254
211. Рассеяние в борновском приближении	256
212. Квантование классического поля излучения	258
213. Вероятность переходов с излучением одного фотона	261
214. Угловое распределение излучения	264
215. Полная вероятность перехода	267
216. Правила отбора для дипольного излучения	268
217. Интенсивности линий лаймановской серии	271
218. Эффект Комптона	273
219. Тормозное излучение	278

Математическое приложение

Криволинейные координаты	285
Г-функция	286
Функции Бесселя	288
Функции Лежандра	292
Сферические гармоники	296
Гипергеометрическая функция	301
Вырожденная гипергеометрическая функция	303
Некоторые функции, определяемые интегралами	305
<i>Предметный указатель к 1-му и 2-му томам</i>	<i>308</i>

III. Частицы со спином

A. Одночастичные задачи

Задача 129. Явный вид матриц Паули

Частица со спином $1/2$ обладает тремя фундаментальными особенностями.

1. Ей присущи внутренние векторные свойства, не зависящие от пространственных координат.

2. Соответствующий вектор представляет собой момент количества движения (спин), который должен быть добавлен к обычному орбитальному моменту частицы.

3. Измеряя какую-либо компоненту спина, можно получить только одно из двух значений: $+1/2\hbar$ или $-1/2\hbar$.

Перечисленные особенности можно описать с помощью двухкомпонентных волновых функций. Соответствующие им спиновые операторы изображаются двухрядными матрицами, явный вид которых будет найден ниже.

Решение. Пусть

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$$

— оператор вектора спина, тогда для его компонент в силу п. 2 должны иметь место перестановочные соотношения

$$S_x S_y - S_y S_x = \hbar i S_z \text{ и т. д.} \quad (129.1a)$$

Они справедливы для операторов момента количества движения. Для безразмерных операторов σ_i эти соотношения принимают вид

$$\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i \sigma_z \text{ и т. д.} \quad (129.1b)$$

Согласно п. 3, собственные значения каждого из операторов σ_i равны $+1$ и -1 , поэтому операторы σ_i должны допускать представление в виде двухрядных матриц в двумерном гильбертовом пространстве. Из-за некоммутативности рассматриваемых матриц все они не могут быть диагональными в одной и той же гильбертовой системе координат. Мы выберем последнюю таким образом, чтобы матрица

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (129.2)$$

была диагональной, тогда единичные координатные векторы можно записать в виде

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ и } \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (129.3)$$

так что

$$\sigma_z \alpha = \alpha, \quad \sigma_z \beta = -\beta. \quad (129.4)$$

Если частица находится в состоянии, описываемом гильбертовым вектором α (β), то в этом состоянии ее спин направлен вдоль положительного (отрицательного) направления оси z .

Матрицы σ_x и σ_y запишем теперь в общем виде:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}. \quad (129.5)$$

Чтобы найти матричные элементы, мы сначала воспользуемся двумя перестановочными соотношениями (129.16), линейными относительно матриц σ_x и σ_y :

$$\sigma_x \sigma_z - \sigma_z \sigma_x = -2i \sigma_y,$$

или

$$\begin{pmatrix} 0 & -2a_{12} \\ 2a_{21} & 0 \end{pmatrix} = -2i \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix},$$

и

$$\sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y = +2i \sigma_x,$$

или

$$\begin{pmatrix} 0 & -2b_{12} \\ 2b_{21} & 0 \end{pmatrix} = +2i \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}.$$

Таким образом, имеем

$$\begin{aligned} a_{11} &= a_{22} = b_{11} = b_{22} = 0, \\ b_{12} &= -ia_{12}, \quad b_{21} = +ia_{21}, \end{aligned} \quad (129.6)$$

и нам остается определить лишь два матричных элемента a_{12} и a_{21} . Третье перестановочное соотношение

$$\sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = 2i \sigma_z,$$

или

$$\begin{pmatrix} 2ia_{12}a_{21} & 0 \\ 0 & -2ia_{12}a_{21} \end{pmatrix} = 2i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

дает еще одно равенство:

$$a_{12}a_{21} = 1. \quad (129.7)$$

Равенства (129.6) и (129.7) все еще оставляют один комплексный параметр, скажем a_{12} , неопределенным. Мы зафиксируем этот параметр, произвольно положив

$$a_{12} = 1, \quad (129.8)$$

так что окончательно матрицы Паули примут вид

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (129.9)$$

Равенства (129.9) можно заменить эквивалентной системой равенств

$$\begin{aligned} \sigma_x \alpha &= \beta, & \sigma_y \alpha &= i\beta, & \sigma_z \alpha &= \alpha, \\ \sigma_x \beta &= \alpha, & \sigma_y \beta &= -i\alpha, & \sigma_z \beta &= -\beta, \end{aligned} \quad (129.10)$$

если воспользоваться собственными векторами (129.3) оператора σ_z .

Задача 130. Собственные векторы матриц Паули

Найти собственные векторы операторов σ_x и σ_y и показать необходимость условия $|a_{12}|^2 = 1$. Выяснить свойства „лестничных“ операторов

$$\sigma_+ = \sigma_x + i\sigma_y \quad \text{и} \quad \sigma_- = \sigma_x - i\sigma_y \quad (130.1)$$

и оператора квадрата вектора спина

$$\sigma^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2. \quad (130.2)$$

Решение. Полагая в результатах предыдущей задачи $a_{12} = a$, получаем

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & a \\ 1/a & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -ia \\ i/a & 0 \end{pmatrix}, \quad (130.3)$$

и, следовательно,

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 2a \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2/a & 0 \end{pmatrix}. \quad (130.4)$$

Пусть далее ψ есть двухкомпонентная волновая функция

$$\psi = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = u \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + v \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = u\alpha + v\beta, \quad (130.5)$$

тогда

$$\begin{aligned} \sigma_x \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} av \\ u/a \end{pmatrix}, & \sigma_y \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -iav \\ iu/a \end{pmatrix}, \\ \sigma_+ \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 2av \\ 0 \end{pmatrix}, & \sigma_- \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 2u/a \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (130.6)$$

Собственные векторы оператора σ_x удовлетворяют уравнению

$$\sigma_x \psi = \lambda \psi,$$

где λ — собственное значение; это уравнение можно записать через компоненты в виде

$$av = \lambda u \quad \text{и} \quad \frac{u}{a} = \lambda v.$$

Последние уравнения совместны только в том случае, если $\lambda = \pm 1$. Таким образом, для собственных векторов получаем

$$\begin{aligned} \psi_1 &= u \begin{pmatrix} 1 \\ 1/a \end{pmatrix} = u \left(\alpha + \frac{1}{a} \beta \right) \quad \text{при} \quad \lambda = 1, \\ \psi_2 &= u \begin{pmatrix} 1 \\ -1/a \end{pmatrix} = u \left(\alpha - \frac{1}{a} \beta \right) \quad \text{при} \quad \lambda = -1. \end{aligned} \quad (130.7)$$

Вероятности ориентаций спина вверх (в положительном направлении оси z) и вниз пропорциональны квадратам модулей коэффициентов при гильбертовых векторах α и β , а именно: 1 и $1/|a|^2$. Так как ни одна из ориентаций не является предпочтительной, то отсюда следует

$$|a|^2 = 1. \quad (130.8)$$

Приведенные рассуждения полностью применимы и к оператору σ_y .

Здесь и всюду в дальнейшем мы для определенности будем полагать, что $a = 1$. Таким образом, собственные значения каждой из матриц σ_i равны $+1$ и -1 , а их собственные векторы имеют вид

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_1 = 2^{-1/2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \psi_2 = 2^{-1/2} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (130.9a)$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_1 = 2^{-1/2} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}, \quad \psi_2 = 2^{-1/2} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}, \quad (130.9б)$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \psi_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (130.9в)$$

Все три матрицы Паули эрмитовы, $\sigma_i^\dagger = \sigma_i$, а их собственные значения действительны. Напротив, операторы

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \quad (130.10)$$

не являются эрмитовыми:

$$\sigma_+^\dagger = \sigma_- \quad \text{и} \quad \sigma_-^\dagger = \sigma_+.$$

Для них задача на собственные значения оказывается неразрешимой, так как эти операторы нельзя привести к диагональному виду. В этом можно убедиться следующим образом.

В наиболее общем случае двухрядную унитарную матрицу можно записать, если отвлечься от несущественного фазового множителя, в виде

$$U = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta e^{i\xi} \\ -\sin \vartheta e^{i\eta} & \cos \vartheta e^{i(\xi+\eta)} \end{pmatrix},$$

где ϑ , ξ , η — действительные параметры. Производя над оператором σ_+ унитарное преобразование, получаем

$$U^\dagger \sigma_+ U = 2e^{i\eta} \begin{pmatrix} -\sin \vartheta \cos \vartheta & \cos^2 \vartheta e^{i\xi} \\ -\sin^2 \vartheta e^{-i\xi} & \sin \vartheta \cos \vartheta \end{pmatrix},$$

но последнюю матрицу нельзя сделать диагональной ни при каком выборе действительных параметров, поскольку функции $\sin \vartheta$ и $\cos \vartheta$ ни при каком значении аргумента ϑ не обращаются в нуль одновременно.

Если операторами σ_+ и σ_- подействовать на гильбертовы векторы α и β , то, согласно равенствам (130.6), получим

$$\begin{aligned} \sigma_+ \alpha = 0, \quad \sigma_- \alpha = 2\beta, \quad \sigma_+ \sigma_- \alpha = 4\alpha, \quad \sigma_- \sigma_+ \alpha = 0, \\ \sigma_+ \beta = 2\alpha, \quad \sigma_- \beta = 0, \quad \sigma_+ \sigma_- \beta = 0, \quad \sigma_- \sigma_+ \beta = 4\beta. \end{aligned} \quad (130.11)$$

Эти операторы удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$\sigma_+ \sigma_z - \sigma_z \sigma_+ = -2\sigma_+, \quad \sigma_- \sigma_z - \sigma_z \sigma_- = +2\sigma_-. \quad (130.12)$$

Если от операторов σ_+ и σ_- перейти к нормированным операторам

$$S_+ = \frac{\hbar}{2} \sigma_+ \quad \text{и} \quad S_- = \frac{\hbar}{2} \sigma_-, \quad (130.13)$$

то они, так же как и операторы L_+ и L_- (см. задачу 56), будут сдвигать собственное значение z -компоненты спина на единицу (в единицах \hbar):

$$\begin{aligned} S_+ \alpha = 0, \quad S_- \alpha = \hbar \beta, \\ S_+ \beta = \hbar \alpha, \quad S_- \beta = 0. \end{aligned}$$

Состояние β с проекцией спина $-1/2 \hbar$ под действием оператора S_+ переходит в состояние α с проекцией спина $+1/2 \hbar$, оператор S_- действует аналогично, но в другую сторону. Выражения $S_+ \alpha$ и $S_- \beta$ по необходимости должны обращаться в нуль, так как, согласно приведенному правилу сдвига, в результате должны были бы получиться состояния с проекциями спина $+3/2 \hbar$ и $-3/2 \hbar$, но таких состояний в рассматриваемом гильбертовом пространстве не существует.

В заключение рассмотрим оператор квадрата вектора спина

$$\sigma^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 = \frac{1}{2} (\sigma_+ \sigma_- + \sigma_- \sigma_+) + \sigma_z^2. \quad (130.14)$$

Нетрудно видеть, что все три матрицы σ_i^2 являются единичными матрицами, поэтому матрица σ^2 диагональна:

$$\sigma^2 = 3 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

а ее значение равно 3, какой бы вектор гильбертова пространства мы ни брали. В справедливости этого результата можно убедиться и с помощью второго из выражений (130.14), воспользовавшись для произведений $\sigma_+ \sigma_-$ и $\sigma_- \sigma_+$ соотношениями (130.11).

Из равенства (130.14) следует

$$S^2 = \frac{3}{4} \hbar^2.$$

Если ввести спиновое квантовое число S , то правую часть последнего равенства можно записать в виде

$$\hbar^2 S(S+1),$$

где $S = 1/2$. Именно это имеют в виду, когда говорят, что состояние имеет „спин $1/2$ “.

Задача 131. Алгебра спиновых матриц

Показать, что три матрицы Паули вместе с единичной матрицей образуют полный набор линейной алгебры.

Решение. Если $1, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ образуют полный базис, то это означает, что в результате сложения или умножения элементов вида

$$N = a_0 + a_1 \sigma_x + a_2 \sigma_y + a_3 \sigma_z, \quad (131.1)$$

где a_i — произвольные комплексные числа, нельзя получить элементов, не принадлежащих рассматриваемой алгебре. Для сложения это очевидно, что же касается умножения пары элементов, то в справедливости сделанного утверждения еще предстоит убедиться. С этой целью мы составим для матриц Паули таблицу умножения.

Пусть i, k, l — произвольная циклическая перестановка трех индексов x, y, z , тогда матрицы σ_i должны удовлетворять перестановочным соотношениям

$$\sigma_i \sigma_k - \sigma_k \sigma_i = 2i \sigma_l \quad (131.2)$$

и нормировочным соотношениям

$$\sigma_i^2 = 1. \quad (131.3)$$

Кроме того, как нетрудно проверить, матрицы Паули антикоммутируют:

$$\sigma_i \sigma_k + \sigma_k \sigma_i = 0, \quad i \neq k. \quad (131.4)$$

Таким образом, складывая и вычитая равенства (131.2) и (131.4), получаем

$$\sigma_i \sigma_k = i \sigma_l, \quad \sigma_k \sigma_i = -i \sigma_l. \quad (131.5)$$

Следовательно, произведение любой пары базисных элементов, если отвлечься от комплексного числового коэффициента, снова является базисным элементом:

Первый сомножитель	Второй сомножитель			
	1	σ_x	σ_y	σ_z
1	1	σ_x	σ_y	σ_z
σ_x	σ_x	1	$i\sigma_z$	$-i\sigma_y$
σ_y	σ_y	$-i\sigma_z$	1	$i\sigma_x$
σ_z	σ_z	$i\sigma_y$	$-i\sigma_x$	1

Следует обратить внимание, что произведение всех трех матриц Паули имеет очень простой вид

$$\sigma_x \sigma_y \sigma_z = i. \quad (131.6)$$

Заметим также, что, согласно приведенной таблице, не имеющие собственных значений операторы σ_+ и σ_- должны удовлетворять равенствам вида

$$\sigma_{\pm}^2 = (\sigma_x \pm i\sigma_y)^2 = \sigma_x^2 - \sigma_y^2 \pm i(\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x) = 0.$$

Этот интересный результат означает, что в алгебре матриц Паули квадрат ненулевого элемента может быть равен нулю. В этой связи следует заметить, что в рассматриваемой алгебре не существует элементов, обратных элементам σ_+ и σ_- .

Ненулевой элемент алгебры, N , удовлетворяющий соотношению

$$N = N^2, \quad (131.7)$$

называется идемпотентным элементом. В нашей алгебре такие элементы имеют вид

$$\frac{1}{2}(1 + \sigma_i) \quad \text{и} \quad \frac{1}{2}(1 - \sigma_i), \quad i = x, y, z. \quad (131.8)$$

В матричном представлении, например, получаем

$$P_+ = \frac{1}{2} (1 + \sigma_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$P_- = \frac{1}{2} (1 - \sigma_z) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Действие операторов P_+ и P_- на базисные векторы гильбертова пространства α и β дает

$$\begin{aligned} P_+ \alpha &= \alpha, & P_- \alpha &= 0, \\ P_+ \beta &= 0, & P_- \beta &= \beta. \end{aligned}$$

Таким образом, эти операторы, действуя на состояния со смешанной спиновой ориентацией, подавляют либо α -, либо β -компоненту смеси

$$P_+ (u\alpha + v\beta) = u\alpha, \quad P_- (u\alpha + v\beta) = v\beta,$$

так что в результате получается вектор, совпадающий по направлению с одним из базисных векторов гильбертова пространства. По этой причине указанные операторы называются проекционными операторами.

Замечание. Алгебра матриц Паули по существу совпадает с алгеброй кватернионов, в которой вместо величин σ_k в качестве базисных элементов используются величины $i\sigma_k$.

Задача 132. Трансформационные свойства спиноров

Как можно показать, что спин одночастичного состояния,

$$\mathbf{s} = \int \psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \psi d^3x, \quad (132.1)$$

представляет собой вектор? Учесть, что матрицы σ_i не преобразуются при повороте пространственных координат и что трансформационные свойства спина \mathbf{s} полностью обусловлены трансформационными свойствами волновой функции.

Решение. Так как пространственные вращения образуют группу, то достаточно рассмотреть бесконечно малые преобразования

$$x'_i = x_i + \sum_k \varepsilon_{ik} x_k, \quad \varepsilon_{ki} = -\varepsilon_{ik}, \quad (132.2)$$

где

$$\varepsilon_{12} = \alpha_3, \quad \varepsilon_{23} = \alpha_1, \quad \varepsilon_{31} = \alpha_2 \quad (132.3)$$

— бесконечно малые углы поворотов относительно координатных осей. Если спин \mathbf{s} является вектором, то он должен преобразо-

вываться по тем же правилам:

$$s'_i = s_i + \sum_k' \varepsilon_{ik} s_k; \quad (132.4)$$

выполнение последних должно обеспечиваться за счет преобразования только самой волновой функции:

$$\psi' = (1 + \xi) \psi, \quad \psi'^{\dagger} = \psi^{\dagger} (1 + \xi^{\dagger}), \quad (132.5)$$

где ξ — инфинитезимальный оператор. Ниже будет найден явный вид указанного преобразования.

Мы начнем с замечания, что произведение $\psi^{\dagger} \psi$ является скаляром, и поэтому должно выполняться равенство

$$\psi'^{\dagger} \psi' = \psi^{\dagger} (1 + \xi^{\dagger}) (1 + \xi) \psi = \psi^{\dagger} \psi,$$

или

$$\xi^{\dagger} = -\xi. \quad (132.6)$$

Подставляя далее выражения (132.6) и (132.5) в формулу (132.1), получаем

$$s'_i = \int \psi^{\dagger} (1 - \xi) \sigma_i (1 + \xi) \psi d^3x = s_i + \int \psi^{\dagger} (\sigma_i \xi - \xi \sigma_i) \psi d^3x.$$

Сравнивая это выражение с выражением (132.4), приходим к уравнениям

$$\sigma_i \xi - \xi \sigma_i = \sum_k' \varepsilon_{ik} \sigma_k, \quad i, k = 1, 2, 3, \quad (132.7)$$

из которых можно определить оператор ξ . Нетрудно проверить, что решение имеет вид

$$\xi = \frac{i}{2} (\varepsilon_{12} \sigma_3 + \varepsilon_{23} \sigma_1 + \varepsilon_{31} \sigma_2). \quad (132.8)$$

Действительно, подставляя приведенное выражение в левую часть (132.7) и используя коммутационные правила, например, для случая $i = 1$, находим

$$\frac{i}{2} [\sigma_1, \varepsilon_{12} \sigma_3 + \varepsilon_{23} \sigma_1 + \varepsilon_{31} \sigma_2] = \frac{i}{2} \{-\varepsilon_{12} \cdot 2i \sigma_2 + \varepsilon_{31} \cdot 2i \sigma_3\} = \varepsilon_{12} \sigma_2 + \varepsilon_{13} \sigma_3,$$

что в точности совпадает с выражением, стоящим в правой части (132.7). Аналогичные результаты получаются и в том случае, когда $i = 2$ или $i = 3$.

Оператору (132.8) можно придать более простой вид, воспользовавшись для углов поворота обозначениями, принятыми в формулах (132.3):

$$\xi = \frac{i}{2} \sum_k \alpha_k \sigma_k. \quad (132.9)$$

Если рассматриваемое преобразование применить к произвольной двухкомпонентной волновой функции

$$\psi = \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = u\alpha + v\beta, \quad (132.10)$$

то в результате получится преобразованная функция

$$\psi' = \begin{pmatrix} u' \\ v' \end{pmatrix} = u'\alpha + v'\beta, \quad (132.10a)$$

где

$$\begin{aligned} u' &= \left(1 + \frac{i}{2}\alpha_3\right)u + \frac{i}{2}(\alpha_1 - i\alpha_2)v, \\ v' &= \frac{i}{2}(\alpha_1 + i\alpha_2)u + \left(1 - \frac{i}{2}\alpha_3\right)v. \end{aligned} \quad (132.11)$$

Двухкомпонентная функция, обладающая такими трансформационными свойствами, называется *спинором*.

Задача 133. Электрон со спином в центральном поле

Найти волновые функции электрона со спином в поле не зависящих от спина центральных сил. Учесть, что волновые функции должны быть собственными функциями двух операторов

$$J^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 \quad \text{и} \quad J_z = L_z + S_z, \quad (133.1)$$

где \mathbf{L} и \mathbf{S} — соответственно орбитальный и спиновый моменты электрона.

Решение. Начнем с z -компоненты момента количества движения. Учитывая, что

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

можно написать

$$J_z = \hbar \begin{pmatrix} -i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -i \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (133.2)$$

Собственные функции этого оператора имеют вид

$$\psi = \begin{pmatrix} C_1 e^{i \left(m_j - \frac{1}{2}\right) \varphi} \\ C_2 e^{i \left(m_j + \frac{1}{2}\right) \varphi} \end{pmatrix}, \quad (133.3)$$

где C_1 и C_2 — пока еще произвольные функции переменных r и θ . В этом нетрудно убедиться, подействовав оператором J_z на функцию ψ . В результате получим

$$J_z \psi = \hbar m_j \psi, \quad (133.4)$$

поэтому величина $\hbar m_j$ есть собственное значение оператора проекции полного момента \mathbf{J} на ось z . Смысл волновой функции (133.3) станет более очевидным, если переписать ее в виде

$$\psi = C_1 e^{i(m_j - \frac{1}{2})\phi} \alpha + C_2 e^{i(m_j + \frac{1}{2})\phi} \beta. \quad (133.3a)$$

Мы видим, что первый член описывает зависимость функции ψ от координат, если спин направлен вверх, а второй член описывает ту же зависимость, если спин направлен вниз. Этой координатной зависимостью определяется значение $\hbar m_j$ проекции орбитального момента \mathbf{L} на ось z , и оно должно быть таким, чтобы $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, т. е. было целым числом. В случае спина, направленного вверх, мы получаем

$$m_j = m_l + \frac{1}{2},$$

а в случае спина, направленного вниз, имеем

$$m_j = m_l - \frac{1}{2}.$$

Таким образом, m_j является полуцелым числом. Этот результат представляет собой хорошо известное из векторной модели правило сложения моментов. Характерная особенность волновой функции (133.3) или (133.3a) состоит в том, что m_j представляет собой „хорошее квантовое число“, а число m_l таковым не является, поскольку вектор ψ есть смесь двух состояний, характеризующихся различными значениями квантового числа m_l .

Перейдем теперь к оператору J^2 . Используя явный вид матриц Паули, входящих в оператор $\mathbf{S} = (\hbar/2) \boldsymbol{\sigma}$, можно написать

$$J^2 = L^2 + S^2 + 2(\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) = L^2 + \frac{3}{4} \hbar^2 + \hbar \begin{pmatrix} L_z & L_- \\ L_+ & -L_z \end{pmatrix}.$$

Таким образом, мы должны решить следующую задачу на собственные значения:

$$J^2 \psi = \begin{pmatrix} L^2 + \frac{3}{4} \hbar^2 + \hbar L_z & \hbar L_- \\ \hbar L_+ & L^2 + \frac{3}{4} \hbar^2 - \hbar L_z \end{pmatrix} \psi = \hbar^2 j(j+1) \psi, \quad (133.5)$$

причем выше по аналогии со случаем орбитального момента L^2

мы произвольно обозначили искомое собственное значение посредством $\hbar^2 j(j+1)$. Чтобы сделать функцию ψ общей собственной функцией операторов J_z и J^2 , мы должны придать ей форму выражения (133.3) и, кроме того, должным образом определить зависимость функций C_1 и C_2 от переменной Φ . Этого можно добиться, полагая, что

$$\psi = \begin{pmatrix} f(r) Y_{l, m_j - \frac{1}{2}}(\Phi, \varphi) \\ g(r) Y_{l, m_j + \frac{1}{2}}(\Phi, \varphi) \end{pmatrix}. \quad (133.6)$$

Сферические гармоники в выражении (133.6) зависят от φ как раз таким образом, как это требуется согласно равенству (133.3). При расчете выражения $J^2\psi$ в соответствии с соотношениями (133.5) и (133.6) мы воспользуемся общими формулами (см. задачу 56):

$$L_+ Y_{l, m} = -\hbar \sqrt{(l+m+1)(l-m)} Y_{l, m+1}, \quad (133.7a)$$

$$L_- Y_{l, m} = -\hbar \sqrt{(l+m)(l-m+1)} Y_{l, m-1}, \quad (133.7b)$$

$$L_z Y_{l, m} = \hbar m Y_{l, m}, \quad (133.7b)$$

$$L^2 Y_{l, m} = \hbar^2 l(l+1) Y_{l, m}. \quad (133.7g)$$

Окончательный результат имеет вид

$$J^2\psi = \hbar^2 \begin{pmatrix} f(r) \left[l(l+1) + \frac{3}{4} + \left(m_j - \frac{1}{2} \right) \right] Y_{l, m_j - \frac{1}{2}} - \\ - g(r) \sqrt{\left(l + m_j + \frac{1}{2} \right) \left(l - m_j + \frac{1}{2} \right)} Y_{l, m_j - \frac{1}{2}} \\ - f(r) \sqrt{\left(l + m_j + \frac{1}{2} \right) \left(l - m_j - \frac{1}{2} \right)} Y_{l, m_j + \frac{1}{2}} + \\ + g(r) \left[l(l+1) + \frac{3}{4} - \left(m_j + \frac{1}{2} \right) \right] Y_{l, m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix}.$$

Поэтому задача на собственные значения (133.5) сводится к двум линейным алгебраическим уравнениям относительно функций $f(r)$ и $g(r)$:

$$\begin{aligned} f \left[l(l+1) + \frac{3}{4} + \left(m_j - \frac{1}{2} \right) - j(j+1) \right] - \\ - g \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - m_j^2} = 0, \\ - f \sqrt{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - m_j^2} + g \left[l(l+1) + \frac{3}{4} - \right. \\ \left. - \left(m_j + \frac{1}{2} \right) - j(j+1) \right] = 0. \end{aligned} \quad (133.8)$$

Тот факт, что нам удалось исключить сферические гармоники, показывает, что выбор функции ψ в виде (133.6) действительно позволяет решить поставленную задачу. Таким образом, и при наличии спина число l все еще является „хорошим“ квантовым числом.

Уравнения (133.8) совместны только в том случае, когда функции $f(r)$ и $g(r)$ отличаются друг от друга лишь постоянным множителем. Поэтому мы положим

$$f(r) = AF(r), \quad g(r) = BF(r), \quad (133.9)$$

а отношение B/A можно будет найти из уравнений (133.8). Так как система линейных уравнений (133.8) однородна, ее определитель должен быть равен нулю:

$$\left[j(j+1) - \left(l + \frac{1}{2} \right)^2 \right]^2 - m_j^2 - \left[\left(l + \frac{1}{2} \right)^2 - m_j^2 \right] = 0. \quad (133.10)$$

Последнее соотношение, как очевидно, не зависит от квантового числа m_j . Это является одним из простейших следствий весьма общей теоремы Вигнера—Эккарта. Имеется два различных значения числа j , удовлетворяющих условию (133.10).

Решение I

$$j = l + \frac{1}{2}, \quad B = -A \sqrt{\frac{l + \frac{1}{2} - m_j}{l + \frac{1}{2} + m_j}},$$

$$\psi_I = \frac{F_I(r)}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l + \frac{1}{2} + m_j} Y_{l, m_j - \frac{1}{2}} \\ -\sqrt{l + \frac{1}{2} - m_j} Y_{l, m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix}. \quad (133.11)$$

Решение II

$$j = l - \frac{1}{2}, \quad B = A \sqrt{\frac{l + \frac{1}{2} + m_j}{l + \frac{1}{2} - m_j}},$$

$$\psi_{II} = \frac{F_{II}(r)}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l + \frac{1}{2} - m_j} Y_{l, m_j - \frac{1}{2}} \\ \sqrt{l + \frac{1}{2} + m_j} Y_{l, m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix}. \quad (133.12)$$

Оба решения нормированы. Так как во всех компонентах волновой функции в качестве множителей фигурируют сферические гармоники одного и того же порядка l , а потенциал предпола-

гается не зависящим от спина, функцию F_l можно определить из радиального уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\chi_l'' - \frac{l(l+1)}{r^2} \chi_l \right) + V(r) \chi_l = E_l \chi_l, \quad (133.13)$$

где

$$\chi_l = r F_l(r). \quad (133.14)$$

Замечание редактора перевода. Формула (133.11) остается справедливой и в случае $l=0$, так как при этом коэффициент, стоящий перед не имеющей смысла сферической гармоникой $Y_{0, \pm 1}$, тождественно равен нулю. Таким образом, в этом случае имеем

$$\psi_I = \frac{F_0(r)}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{при } l=0, m_j = +\frac{1}{2}$$

и

$$\psi_I = -\frac{F_0(r)}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{при } l=0, m_j = -\frac{1}{2}.$$

Что же касается второго решения, ψ_{II} , то при $l=0$ оно не существует, так как квантовое число j по определению положительно.

Задача 134. Квадрупольный момент при наличии спина

Вычислить квадрупольный момент одноэлектронного состояния в сферически симметричном потенциальном поле, приняв во внимание наличие спина.

Решение. Квадрат модуля собственной функции [см. равенства (133.11) и (133.12)] выражается формулой

$$|\psi_I|^2 = \frac{|F_l(r)|^2}{2l+1} \left\{ \left(l + \frac{1}{2} + m_j \right) \left| Y_{l, m_j - \frac{1}{2}} \right|^2 + \left(l + \frac{1}{2} - m_j \right) \left| Y_{l, m_j + \frac{1}{2}} \right|^2 \right\}, \quad (134.1a)$$

если $j = l + 1/2$, и формулой

$$|\psi_{II}|^2 = \frac{|F_l(r)|^2}{2l+1} \left\{ \left(l + \frac{1}{2} - m_j \right) \left| Y_{l, m_j - \frac{1}{2}} \right|^2 + \left(l + \frac{1}{2} + m_j \right) \left| Y_{l, m_j + \frac{1}{2}} \right|^2 \right\}, \quad (134.16)$$

если $j = l - 1/2$. Напомним, что $|m_j| \leq j$ и что при $l=0$ решение, соответствующее функции ψ_{II} , отсутствует.

Так как выражения (134.1a) и (134.16) не зависят от угла φ , то здесь остаются в силе аргументы, приведенные в задаче 61,

поэтому средние значения недиагональных элементов тензора квадрупольного момента обращаются в нуль, а средние значения его диагональных элементов связаны соотношением

$$\langle Q_{xx} \rangle = \langle Q_{yy} \rangle = -\frac{1}{2} \langle Q_{zz} \rangle. \quad (134.2)$$

Таким образом, мы опять должны вычислить лишь одну величину $\langle Q_{zz} \rangle$, определяемую формулой

$$\langle Q_{zz} \rangle = \int |\psi|^2 r^2 (3\cos^2 \vartheta - 1) d^3x. \quad (134.3)$$

Подставляя сюда выражения (134.1а) и (134.1б) и учитывая доказанное в задаче 61 соотношение

$$\oint (3\cos^2 \vartheta - 1) |Y_{l, m}|^2 d\Omega = \frac{2l(l+1) - 6m^2}{(2l-1)(2l+3)}, \quad (134.4)$$

получаем

$$\langle Q_{zz} \rangle = \frac{\langle r^2 \rangle}{2l+1} \left\{ \left(l + \frac{1}{2} \pm m_j \right) \frac{2l(l+1) - 6\left(m_j - \frac{1}{2} \right)^2}{(2l-1)(2l+3)} + \right. \\ \left. + \left(l + \frac{1}{2} \mp m_j \right) \frac{2l(l+1) - 6\left(m_j + \frac{1}{2} \right)^2}{(2l-1)(2l+3)} \right\}.$$

Здесь верхний знак относится к случаю $j = l + 1/2$, а нижний — к случаю $j = l - 1/2$ и $l \geq 1$, и, кроме того, введено обозначение

$$\int_0^{\infty} r^4 |F_l(r)|^2 dr = \langle r^2 \rangle. \quad (134.5)$$

После элементарной перегруппировки членов в фигурных скобках полученное выражение приводится к виду

$$\langle Q_{zz} \rangle = \langle r^2 \rangle \frac{2l(l+1) - 6\left(m_j^2 + \frac{1}{4} \right) \pm \frac{12}{2l+1} m_j^2}{(2l-1)(2l+3)}, \quad (134.6)$$

удобному для сравнения с выражением (61.8).

Последнюю формулу можно записать в более компактном виде, если заменить квантовое число l числом j :

$$\langle Q_{zz} \rangle = \langle r^2 \rangle \cdot \frac{1}{2} \left(1 - \frac{3m_j^2}{j(j+1)} \right). \quad (134.7)$$

Эта формула имеет место при любом выборе знака в выражении $j = l \pm 1/2$. В нижеследующей таблице приведены числовые результаты для нескольких первых значений квантового числа j .

Состояния	i	$\langle Q_{zz} \rangle / \langle r^2 \rangle$ для			
		$m_j = \pm \frac{1}{2}$	$m_j = \pm \frac{3}{2}$	$m_j = \pm \frac{5}{2}$	$m_j = \pm \frac{7}{2}$
$S_{1/2}, P_{1/2}$	$1/2$	0	—	—	—
$P_{3/2}, D_{3/2}$	$3/2$	$+2/5$	$-2/5$	—	—
$D_{5/2}, F_{5/2}$	$5/2$	$+16/35$	$+4/35$	$-20/35$	—
$F_{7/2}, G_{7/2}$	$7/2$	$+10/21$	$+6/21$	$-2/21$	$-14/21$

Из таблицы видно, что при $j=1/2$ сферической симметрией обладают как S -, так и P -состояния. Вообще можно установить, что по мере увеличения значений $|m_j|$ вытянутая форма электронного распределения заменяется на сплюснутую.

Сумма чисел $\langle Q_{zz} \rangle / \langle r^2 \rangle$, стоящих в нашей таблице на одной строке, как нетрудно видеть, равна нулю. Это объясняется тем, что такое суммирование приводит к конфигурации замкнутой оболочки. В этом можно убедиться и в общем случае, если принять во внимание, что

$$\sum_{m_j=1/2}^j 1 = j + \frac{1}{2}$$

и

$$\sum_{m_j=1/2}^j m_j^2 = \frac{1}{3} j \left(j + \frac{1}{2} \right) (j + 1).$$

С учетом этих соотношений имеем

$$\sum_{m_j=1/2}^j \langle Q_{zz} \rangle = \frac{1}{2} \langle r^2 \rangle \left\{ \sum_{m_j=1/2}^j 1 - \frac{3}{j(j+1)} \sum_{m_j=1/2}^j m_j^2 \right\} = 0.$$

Задача 135. Среднее значение магнитного момента

Для электрона со спином в центральном поле вычислить средние значения всех трех проекций векторов \mathbf{S} , \mathbf{L} и \mathbf{J} , а также вектора магнитного момента.

Решение. Пусть

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}$$

— собственный спинор, тогда

$$\begin{aligned} u^\dagger S_x u &= \frac{\hbar}{2} (u_1^* u_2 + u_2^* u_1), \\ u^\dagger S_y u &= \frac{\hbar}{2i} (u_1^* u_2 - u_2^* u_1), \\ u^\dagger S_z u &= \frac{\hbar}{2} (u_1^* u_1 - u_2^* u_2). \end{aligned} \quad (135.1)$$

Согласно результатам задачи 133 для собственных спиноров J^2 и J_z имеем

$$\begin{aligned} u_1 &= \frac{F_l(r)}{\sqrt{2l+1}} A_{l, l} Y_{l, m_j - \frac{1}{2}}, \\ u_2 &= \frac{F_l(r)}{\sqrt{2l+1}} B_{l, l} Y_{l, m_j + \frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (135.2)$$

где

$$A_{l+\frac{1}{2}, l} = \sqrt{l + \frac{1}{2} + m_j}, \quad B_{l+\frac{1}{2}, l} = -\sqrt{l + \frac{1}{2} - m_j} \quad (135.3a)$$

и

$$A_{l-\frac{1}{2}, l} = \sqrt{l + \frac{1}{2} - m_j}, \quad B_{l-\frac{1}{2}, l} = \sqrt{l + \frac{1}{2} + m_j}. \quad (135.3b)$$

Таким образом, в выражениях (135.1), которые используются для вычисления средних значений S_x и S_y , отдельные члены будут содержать произведения различных сферических функций, поэтому

$$\langle S_x \rangle = 0 \quad \text{и} \quad \langle S_y \rangle = 0.$$

С другой стороны, для среднего значения S_z и нормировочного интеграла мы соответственно имеем

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \int_0^\infty r^2 \frac{|F_l(r)|^2}{2l+1} (A_{l, l}^2 - B_{l, l}^2) dr \quad (135.4)$$

и

$$\int_0^\infty r^2 \frac{|F_l(r)|^2}{2l+1} (A_{l, l}^2 + B_{l, l}^2) dr = \int_0^\infty r^2 |F_l(r)|^2 dr = 1. \quad (135.5)$$

Отсюда следует

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \frac{A_{l, l}^2 - B_{l, l}^2}{A_{l, l}^2 + B_{l, l}^2}. \quad (135.6)$$

В состояниях с $j = l + 1/2$ имеем

$$\langle S_z \rangle_+ = \hbar m_j \frac{1}{2l+1} = \hbar m_j \cdot \frac{1}{2j}, \quad (135.7a)$$

если же $j = l - 1/2$, то

$$\langle S_z \rangle_- = -\hbar m_j \cdot \frac{1}{2l+1} = -\hbar m_j \cdot \frac{1}{2(j+1)}. \quad (135.7b)$$

Средние значения проекций орбитального момента можно получить аналогичным образом, рассматривая выражение

$$u^\dagger L u = u_1^* L u_1 + u_2^* L u_2.$$

Так как операторы $L_x \pm iL_y$ изменяют второй индекс сферической функции на ± 1 , то средние значения L_x и L_y снова обращаются в нуль (см. задачу 58), а для среднего значения L_z имеем

$$\langle L_z \rangle = \hbar \cdot \frac{\int \left\{ u_1^* \left(m_j - \frac{1}{2} \right) u_1 + u_2^* \left(m_j + \frac{1}{2} \right) u_2 \right\} d^3x}{\int \left\{ u_1^* u_1 + u_2^* u_2 \right\} d^3x},$$

или

$$\langle L_z \rangle = \hbar \cdot \frac{A_{j,l}^2 \left(m_j - \frac{1}{2} \right) + B_{j,l}^2 \left(m_j + \frac{1}{2} \right)}{A_{j,l}^2 + B_{j,l}^2}.$$

Если воспользоваться формулой (135.6), то последнему результату можно придать более простой вид:

$$\langle L_z \rangle = \hbar m_j \langle S_z \rangle. \quad (135.8)$$

Эту формулу мы могли бы получить сразу, если бы учли, что u есть собственный спинор оператора $J_z = L_z + S_z$, принадлежащий собственному значению $\hbar m_j$.

Средние значения J_x и J_y также равны нулю, поскольку равны нулю средние значения соответствующих проекций векторов L и S .

Оператор магнитного момента имеет вид

$$\mathbf{M} = -\frac{e}{2mc} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}), \quad (135.9)$$

где $-e$ — электрический заряд электрона. Средние значения проекций магнитного момента на оси x и y обращаются в нуль, однако

$$\langle M_z \rangle = -\frac{e}{2mc} \{ \langle L_z \rangle + 2 \langle S_z \rangle \}, \quad (135.10)$$

что с учетом формулы (135.8) можно записать в виде

$$\langle M_z \rangle = -\frac{e}{2mc} (\hbar m_j + \langle S_z \rangle).$$

Отсюда, принимая во внимание соотношения (135.7a) и (135.76), находим, что в состояниях с $j = l + 1/2$

$$\langle M_z \rangle_+ = -\frac{e\hbar}{2mc} m_j \left(1 + \frac{1}{2j} \right) = -\frac{e\hbar}{2mc} m_j \frac{2j+1}{2j}, \quad (135.11a)$$

а в состояниях с $j = l - 1/2$

$$\langle M_z \rangle_- = -\frac{e\hbar}{2mc} m_j \left(1 - \frac{1}{2(j+1)} \right) = -\frac{e\hbar}{2mc} m_j \frac{2j+1}{2j+2}. \quad (135.116)$$

Замечание. Приведенные формулы показывают, что в замкнутой подоболчке (n, l) результирующий магнитный момент равен нулю как в случае $j = l + 1/2$, так и в случае $j = l - 1/2$.

Множитель, стоящий в формулах (135.11a) и (135.116) при величине $-(e\hbar/2mc) m_j$, называется g -фактором Ландé рассматриваемого состояния. Он позволяет записать величину $\langle M_z \rangle$ в виде

$$\langle M_z \rangle = -\frac{e\hbar}{2mc} m_j g(j) = -\frac{e}{2mc} \langle J_z \rangle g(j).$$

Отсюда видно, что g -фактор Ландé описывает отклонение от классического соотношения Максвелла между магнитным и механическим моментами частицы, обусловленное наличием у частицы спина.

Задача 136. Тонкая структура

Взаимодействие собственного магнитного момента электрона,

$$\boldsymbol{\mu} = -g \frac{e}{mc} \mathbf{S}, \quad (136.1)$$

с его орбитальным моментом \mathbf{L} описывается членом в гамильтониане вида

$$H' = \frac{g}{2m^2c^3} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} (\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}). \quad (136.2)$$

Определить обусловленное этим взаимодействием расщепление энергетических уровней.

Замечание. Так называемый g -фактор электрона очень близок к единице. Как было установлено, его точное значение равно 1,001145. Так как полную теорию тонкой структуры нельзя построить, оставаясь в рамках нерелятивистской квантовой механики, то к введенному выше g -фактору не следует относиться слишком серьезно. Это же замечание в полной мере относится и к мно-

жителю 2 в знаменателе выражения (136.2) (так называемая поправка Томаса ¹⁾), его появление невозможно объяснить в рамках нерелятивистской теории.

Решение. Волновая функция электрона в центральном поле есть одновременно собственная функция операторов J^2 и J_z ; ее угловая зависимость была установлена в одной из предыдущих задач, поэтому фигурирующий в гамильтониане (136.2) оператор $(\mathbf{S} \cdot \mathbf{L})$ можно исключить, имея в виду, что для состояния $\psi = |j, l\rangle$ справедливо соотношение

$$J^2 |j, l\rangle = \{L^2 + S^2 + 2(\mathbf{S} \cdot \mathbf{L})\} |j, l\rangle,$$

или

$$\hbar^2 \left\{ j(j+1) - \left[l(l+1) + \frac{3}{4} \right] \right\} |j, l\rangle = 2(\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}) |j, l\rangle.$$

Таким образом, наличие в гамильтониане члена (136.2) в конечном счете добавляет к потенциальной энергии $V(r)$ энергию возмущения вида

$$V'(r) = \frac{g\hbar^2}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \left\{ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right\}. \quad (136.3)$$

Эта энергия зависит от квантовых чисел j и l , и поэтому при одном и том же значении l она будет различной для разных значений $j = l \pm 1/2$.

В первом порядке теории возмущений поправка к уровню энергии определяется формулой ²⁾

$$E'_{j,l} = \langle j, l | V' | j, l \rangle, \quad (136.4)$$

Пользуясь теми же обозначениями, что и в выражениях (133.11) и (133.12) и принимая во внимание условие нормировки,

$$\int_0^\infty r^2 |F_l(r)|^2 dr = 1, \quad (136.5)$$

получаем

$$E'_{j,l} = \frac{g\hbar^2}{4m^2c^2} \left\{ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right\} \int_0^\infty r^2 |F_l(r)|^2 \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} dr. \quad (136.6)$$

Таким образом, расщепление уровней с одним и тем же значением l , но различными значениями j оказывается пропорциональным разности

$$\left(l + \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{3}{2} \right) - \left(l - \frac{1}{2} \right) \left(l + \frac{1}{2} \right) = 2l + 1,$$

¹⁾ Обычно ее называют поправкой Томаса — Френкеля. — *Прим. *ред.*

²⁾ Матрица энергии возмущения (136.3) диагональна по квантовому числу m_j , поэтому можно обойтись формулами теории возмущения без вырождения. — *Прим. ред.*

поэтому

$$\Delta E = \frac{g\hbar^2}{4m^2c^2} (2l+1) \int_0^\infty r^2 |F_l(r)|^2 \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} dr. \quad (136.7)$$

Заметим, что подуровень с меньшим значением j располагается снизу (нормальный дублет).

Некоторое представление о величине интеграла (136.7) можно получить, взяв в качестве потенциала выражение

$$V = -\frac{Ze^2}{r}, \quad \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} = \frac{Ze^2}{r^3}. \quad (136.8)$$

Так как вблизи ядра всякого атома потенциал ведет себя указанным образом и так как в этой области

$$F_l \sim r^l,$$

то подынтегральное выражение в (136.7) пропорционально r^{2l-1} и, следовательно, интеграл конечен при $l=1, 2, 3, \dots$ и логарифмически расходится для S -состояний, когда $l=0$. Поскольку S -состояния не расщепляются, а лишь сдвигаются, последний результат не имеет особого значения при анализе спектроскопических данных. В аккуратной релятивистской теории трудность вообще не возникает (см. задачу 203).

И без детальных вычислений интегралов типа (136.7) можно с уверенностью сказать, что результат имеет величину порядка Ze^2/a^3 , где a — величина такого же порядка, что и радиус атома. Так как атомные термы имеют порядок Ze^2/a , то, грубо говоря,

$$\frac{\Delta E}{E} \sim \frac{\lambda^2}{a^2},$$

где $\lambda = \hbar/mc$ — комптоновская длина волны. Она представляет собой малую величину, поэтому обсуждаемый эффект действительно носит характер тонкой структуры, и для его рассмотрения можно ограничиться, как это и было сделано, первым порядком теории возмущений.

Задача 137. Плоские волны для частиц со спином $1/2$

Разложить плоскую волну, описывающую свободную частицу со спином $1/2$ в ряд по сферическим гармоникам. Рассмотреть случаи положительной и отрицательной спиральности. Считать, что волна распространяется в положительном направлении оси z .

Решение. Плоским волнам, распространяющимся в положительном направлении оси z , отвечают два спинора

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{ikz} \quad \text{и} \quad \psi_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{ikz}. \quad (137.1)$$

В состоянии ψ_+ спин частицы направлен по движению, и мы говорим о *положительной спиральности*, $h = +1$. В состоянии ψ_- спин направлен против движения, и $h = -1$. Если разложить рассматриваемые спиноры по собственным функциям полного момента количества движения, то в обоих случаях $m_l = 0$, а $m_j = +1/2$ для состояния ψ_+ и $m_j = -1/2$ для состояния ψ_- .

В задаче 133 было показано, что при данном значении орбитального квантового числа l имеется два рода общих собственных спиноров операторов J_z и J^2 , а именно

$$u_{l, m_j}^I = \frac{F_l(r)}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l + \frac{1}{2} + m_j} Y_{l, m_j - \frac{1}{2}} \\ -\sqrt{l + \frac{1}{2} - m_j} Y_{l, m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \quad (137.2a)$$

если $j = l + 1/2$, и

$$u_{l, m_j}^{II} = \frac{F_l(r)}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l + \frac{1}{2} - m_j} Y_{l, m_j - \frac{1}{2}} \\ \sqrt{l + \frac{1}{2} + m_j} Y_{l, m_j + \frac{1}{2}} \end{pmatrix}, \quad (137.2b)$$

если $j = l - 1/2$, причем функция $F_l(r)$ удовлетворяет радиальному уравнению Шредингера. Для свободной частицы оно имеет вид

$$F_l'' + \frac{2}{r} F_l' + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) F_l = 0, \quad (137.3)$$

и для регулярного в нуле решения (нормировка произвольная) мы имеем выражение

$$F_l = \frac{1}{kr} j_l(kr). \quad (137.4)$$

Теперь разложение плоской волны по решениям (137.2a) и (137.2b) можно записать в следующем виде:

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} (A_l u_{l, m_j}^I + B_l u_{l, m_j}^{II}). \quad (137.5)$$

Мы начнем со случая положительной спиральности $h = +1$, когда $m_j = +1/2$. Равенство (137.5) в этом случае принимает вид

$$\psi_+ = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2l+1}} j_l(kr) \begin{pmatrix} (A_l \sqrt{l+1} + B_l \sqrt{l}) Y_{l, 0} \\ (-A_l \sqrt{l} + B_l \sqrt{l+1}) Y_{l, 1} \end{pmatrix}. \quad (137.6)$$

Чтобы вторая компонента спинора обратилась в нуль, как это требуется согласно равенству (137.1), мы должны положить

$$B_l = \sqrt{\frac{l}{l+1}} A_l. \quad (137.7)$$

Таким образом, получаем

$$\psi_+ = \frac{1}{kr} \binom{1}{0} \sum_{l=0}^{\infty} A_l \sqrt{\frac{2l+1}{l+1}} j_l(kr) Y_{l,0}. \quad (137.8)$$

Из сравнения последнего выражения с обычным разложением плоской волны [см. формулу (81.13)],

$$e^{ikz} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l j_l(kr) Y_{l,0}, \quad (137.9)$$

следует

$$A_l = \sqrt{4\pi(l+1)} i^l, \quad (137.10)$$

поэтому окончательное выражение принимает вид

$$\psi_+ = \sqrt{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (\sqrt{l+1} u_{l,1/2}^I + \sqrt{l} u_{l,1/2}^{II}). \quad (137.11)$$

В противоположном случае, когда $h = -1$ и $m_j = -1/2$, равенство (137.5) записывается в виде

$$\psi_- = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2l+1}} j_l(kr) \begin{pmatrix} (A_l \sqrt{l} + B_l \sqrt{l+1}) Y_{l,-1} \\ (-A_l \sqrt{l+1} + B_l \sqrt{l}) Y_{l,0} \end{pmatrix}. \quad (137.12)$$

Теперь, согласно равенству (137.1), должна обратиться в нуль первая компонента спинора, следовательно,

$$B_l = -\sqrt{\frac{l}{l+1}} A_l. \quad (137.13)$$

Далее из сравнения с разложением (137.9) вытекает

$$A_l = -\sqrt{4\pi(l+1)} i^l, \quad (137.14)$$

поэтому окончательно мы приходим к разложению вида

$$\psi_- = -\sqrt{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (\sqrt{l+1} u_{l,-1/2}^I - \sqrt{l} u_{l,-1/2}^{II}). \quad (137.15)$$

Задача 138. Спиновый резонанс для свободного электрона

Свободный электрон помещен в полость, где имеется два магнитных поля: одно поле постоянное и однородное, \mathcal{H}_0 , направленное по оси z , другое поле, \mathcal{H}' , вращающееся в плоскости xy :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_x &= 0, & \mathcal{H}_y &= 0, & \mathcal{H}_z &= \mathcal{H}_0, \\ \mathcal{H}'_x &= \mathcal{H}' \cos \omega t, & \mathcal{H}'_y &= \mathcal{H}' \sin \omega t, & \mathcal{H}'_z &= 0. \end{aligned} \quad (138.1)$$

В момент времени $t=0$ спин электрона направлен по оси z ; в этот же момент включается поле \mathcal{H}' . Найти вероятность P обнаружения электрона, спин которого ориентирован против оси z , как функцию времени t .

Решение. Для нашей задачи гамильтониан имеет вид

$$H = \mu (\sigma_z \mathcal{H}_0 + \sigma_x \mathcal{H}'_x + \sigma_y \mathcal{H}'_y),$$

где $-\mu\sigma$ — оператор собственного магнитного момента электрона, а $\mu = e\hbar/(2mc)$ (теоретико-полевые поправки не учитываются). Заметим, что

$$\sigma_x \mathcal{H}'_x + \sigma_y \mathcal{H}'_y = \frac{1}{2} \mathcal{H}' (\sigma_+ e^{-i\omega t} + \sigma_- e^{i\omega t}),$$

где

$$\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y,$$

поэтому уравнение Шредингера принимает вид

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mu \left\{ \mathcal{H}_0 \sigma_z + \frac{1}{2} \mathcal{H}' (e^{-i\omega t} \sigma_+ + e^{i\omega t} \sigma_-) \right\} \psi. \quad (138.2)$$

Решение этого уравнения можно выразить через собственные функции оператора σ_z :

$$\psi(t) = u(t)\alpha + v(t)\beta. \quad (138.3)$$

Подставляя выражение (138.3) в уравнение (138.2) и пользуясь соотношениями [см. формулы (129.10)]

$$\begin{aligned} \sigma_z \alpha &= \alpha, & \sigma_+ \alpha &= 0, & \sigma_- \alpha &= 2\beta, \\ \sigma_z \beta &= -\beta, & \sigma_+ \beta &= 2\alpha, & \sigma_- \beta &= 0, \end{aligned}$$

получаем

$$-\frac{\hbar}{i} (i\dot{\alpha} + \dot{v}\beta) = \mu \mathcal{H}_0 (u\alpha - v\beta) + \mu \mathcal{H}' (e^{-i\omega t} v\alpha + e^{i\omega t} u\beta).$$

Собирая теперь коэффициенты при α и β и вводя обозначения

$$\frac{\mu \mathcal{H}_0}{\hbar} = \omega_0, \quad \frac{\mu \mathcal{H}'}{\hbar} = \omega', \quad (138.4)$$

приходим к системе уравнений

$$\begin{aligned} i\dot{u} &= \omega_0 u + \omega' e^{-i\omega t} v, \\ i\dot{v} &= -\omega_0 v + \omega' e^{i\omega t} u. \end{aligned} \quad (138.5)$$

Решение этой системы имеет вид

$$u = A e^{-i(\Omega + 1/2\omega)t}, \quad v = B e^{-i(\Omega - 1/2\omega)t}. \quad (138.6)$$

Непосредственный подсчет показывает, что возможны два случая:

$$\Omega_1 = +\Omega \quad \text{и} \quad \Omega_2 = -\Omega,$$

где

$$\Omega = \sqrt{\left(\omega_0 - \frac{1}{2}\omega\right)^2 + \omega'^2}. \quad (138.7)$$

Соответствующие этим случаям амплитуды обозначаются ниже посредством A_1 , B_1 и A_2 , B_2 . Окончательный результат записывается в виде

$$\psi(t) = (A_1 e^{-i\Omega t} + A_2 e^{i\Omega t}) e^{-\frac{i\omega}{2}t} \alpha + (B_1 e^{-i\Omega t} + B_2 e^{i\Omega t}) e^{\frac{i\omega}{2}t} \beta, \quad (138.8)$$

причем

$$B_{1,2} = A_{1,2} \frac{\pm \Omega - \left(\omega_0 - \frac{1}{2}\omega\right)}{\omega'}. \quad (138.9)$$

Потребуем теперь, чтобы решение (138.8) удовлетворяло начальному условию $\psi(0) = \alpha$, или

$$A_1 + A_2 = 1, \quad B_1 + B_2 = 0. \quad (138.10)$$

Это требование с учетом соотношений (138.9) дает

$$\psi(t) = \left\{ \cos \Omega t - \frac{\omega_0 - \frac{1}{2}\omega}{\Omega} i \sin \Omega t \right\} e^{-\frac{i\omega}{2}t} \alpha - \frac{\omega'}{\Omega} i \sin \Omega t e^{\frac{i\omega}{2}t} \beta. \quad (138.11)$$

Отсюда для вероятности обнаружения электрона с противоположным направлением спина в момент времени t получаем формулу

$$P = \left(\frac{\omega'}{\Omega}\right)^2 \sin^2 \Omega t, \quad (138.12)$$

которая после усреднения по времени дает

$$\bar{P} = \frac{1}{2} \frac{\omega'^2}{\Omega^2} = \frac{1}{2} \frac{\omega'^2}{\left(\omega_0 - \frac{1}{2}\omega\right)^2 + \omega'^2}. \quad (138.13)$$

Если производить медленное изменение однородного поля \mathcal{H}_0 , а тем самым, согласно (138.4), и ларморовой частоты ω_0 , то для значения

$$\omega_0 = \frac{1}{2} \omega, \quad \text{т. е.} \quad \mathcal{H}_0 = \frac{\hbar \omega}{2\mu}, \quad (138.14)$$

средняя вероятность обнаружения электрона с противоположным направлением спина (спин-флипа) станет максимальной. Мы назовем такое поле резонансным и обозначим его посредством $\mathcal{H}_{\text{рез}}$, тогда

$$\bar{P} = \frac{1}{2} \frac{\mathcal{H}'^2}{(\mathcal{H}_0 - \mathcal{H}_{\text{рез}})^2 + \mathcal{H}'^2}. \quad (138.15)$$

При резонансе $\bar{P} = 1/2$ независимо от напряженности вращающегося поля \mathcal{H}' , однако ширина резонансной области, разумеется, определяется величиной \mathcal{H}' .

Замечание. Этот метод можно применять либо для определения величины μ по напряженности резонансного поля, либо, если величина μ достаточно хорошо известна, для определения разности между внешним полем и полем, действующим на электрон внутри молекулы. Для распознавания молекулярных структур похожим образом можно использовать и протонный резонанс.

Б. Двух- и трехчастичные задачи

Задача 139. Спиновые функции двух частиц

Имеется система из двух частиц со спином $1/2$ (например, нейтрон и протон). Найти спиновые функции системы, диагонализующие одновременно z -компоненту и квадрат оператора суммарного спина

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} (\boldsymbol{\sigma}_n + \boldsymbol{\sigma}_p). \quad (139.1)$$

Решение. Пусть α_n, β_n — гильбертовы базисные векторы нейтрона, а α_p, β_p — базисные векторы протона. Тогда спиновая функция χ двухчастичной системы должна иметь вид

$$\chi = A\alpha_n\alpha_p + B\alpha_n\beta_p + C\beta_n\alpha_p + D\beta_n\beta_p. \quad (139.2)$$

Из определения спиновых операторов (см. задачу 129) следует

$$\begin{aligned} \frac{2}{\hbar} S_z \chi &= (\sigma_{nz} + \sigma_{pz}) \chi = A\alpha_n\alpha_p + B\alpha_n\beta_p - C\beta_n\alpha_p - D\beta_n\beta_p + \\ &+ A\alpha_n\alpha_p - B\alpha_n\beta_p + C\beta_n\alpha_p - D\beta_n\beta_p. \end{aligned} \quad (139.3)$$

Таким образом, каждый отдельный член в выражении (139.2) является собственной функцией оператора S_z :

Собственные функции	Собственные значения оператора $\frac{2}{\hbar} S_z$	Собственные значения оператора S_z
$\alpha_n \alpha_p$	+2	$+\hbar$
$\alpha_n \beta_p$	0	0
$\beta_n \alpha_p$	0	0
$\beta_n \beta_p$	-2	$-\hbar$

Значения проекции спина $+1, 0, -1$ (в единицах \hbar) согласуются с полуклассической векторной моделью. Нулевое собственное значение является вырожденным: ему принадлежат две собственные функции, $\alpha_n \beta_p$ и $\beta_n \alpha_p$, а следовательно, и любая их линейная комбинация.

Рассмотрим теперь оператор

$$\left(\frac{2}{\hbar}\right)^2 \mathbf{S}^2 = \sigma_n^2 + \sigma_p^2 + 2(\sigma_n \cdot \sigma_p) = 6 + 2(\sigma_{nx}\sigma_{px} + \sigma_{ny}\sigma_{py} + \sigma_{nz}\sigma_{pz}).$$

Мы имеем

$$\begin{aligned} \sigma_{nx}\sigma_{px}\chi &= A\beta_n\beta_p + B\beta_n\alpha_p + C\alpha_n\beta_p + D\alpha_n\alpha_p, \\ \sigma_{ny}\sigma_{py}\chi &= -A\beta_n\beta_p + B\beta_n\alpha_p + C\alpha_n\beta_p - D\alpha_n\alpha_p, \\ \sigma_{nz}\sigma_{pz}\chi &= A\alpha_n\alpha_p - B\alpha_n\beta_p - C\beta_n\alpha_p + D\beta_n\beta_p \end{aligned}$$

и, следовательно,

$$\left(\frac{2}{\hbar}\right)^2 \mathbf{S}^2 \alpha_n \alpha_p = 8 \alpha_n \alpha_p, \quad (139.4a)$$

$$\left(\frac{2}{\hbar}\right)^2 \mathbf{S}^2 (B\alpha_n \beta_p + C\beta_n \alpha_p) = 4(B+C)(\alpha_n \beta_p + \beta_n \alpha_p), \quad (139.4b)$$

$$\left(\frac{2}{\hbar}\right)^2 \mathbf{S}^2 \beta_n \beta_p = 8 \beta_n \beta_p. \quad (139.4b)$$

Мы видим, что функции $\alpha_n \alpha_p$ и $\beta_n \beta_p$ принадлежат собственному значению $2\hbar^2$ оператора \mathbf{S}^2 . Вводя обычные обозначения

$$\mathbf{S}^2 \chi = \hbar^2 S(S+1)\chi, \quad (139.5)$$

можно сказать, что эти функции характеризуются квантовым числом $S=1$. На языке полуклассической векторной модели это означает, что суммарный спин $S=1$ (в единицах \hbar), а его проекция S_z равна либо $+1$, либо -1 .

Основываясь на равенстве (139.4b), мы можем сконструировать еще две собственные функции оператора \mathbf{S}^2 , принадлежащие собственному значению $S_z=0$. Пусть λ —пока не известное собственное значение оператора \mathbf{S}^2/\hbar^2 . Тогда можно написать

$$(B+C)(\alpha_n \beta_p + \beta_n \alpha_p) = \lambda (B\alpha_n \beta_p + C\beta_n \alpha_p).$$

Это дает два линейных уравнения для определения B и C :

$$B + C = \lambda B, \quad B + C = \lambda C.$$

Детерминант этой системы должен обратиться в нуль:

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 1 \\ 1 & 1-\lambda \end{vmatrix} = 0, \quad \text{или} \quad 1-\lambda = \pm 1.$$

Таким образом, для двух собственных функций оператора S^2 , принадлежащих собственному значению $S_z = 0$, получаем

$$\text{для } \lambda = 2 \quad B = C, \quad \chi = \alpha_n \beta_p + \beta_n \alpha_p, \quad S = 1; \quad (139.6a)$$

$$\text{для } \lambda = 0 \quad B = -C, \quad \chi = \alpha_n \beta_p - \beta_n \alpha_p, \quad S = 0. \quad (139.6b)$$

Окончательные результаты собраны в приводимой ниже таблице, причем собственные функции нормированы с учетом условий

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1, \quad \langle \beta | \beta \rangle = 1, \quad \langle \alpha | \beta \rangle = 0.$$

Триплет, $S=1$ (симметричная спиновая функция)	$S_z = +1$ $S_z = 0$ $S_z = -1$	$\alpha_n \alpha_p$ $\frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_n \beta_p + \beta_n \alpha_p)$ $\beta_n \beta_p$
Синглет, $S=0$ (антисимметричная спиновая функция)	$S_z = 0$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_n \beta_p - \beta_n \alpha_p)$

Замечание. Из равенства

$$(\sigma_n + \sigma_p)^2 = 6 + 2(\sigma_n \cdot \sigma_p)$$

следует, что триплетные и синглетная спиновые функции, χ_t и χ_s , приведенные в таблице, являются также собственными функциями оператора $(\sigma_n \cdot \sigma_p)$, причем

$$(\sigma_n \cdot \sigma_p) \chi_t = \chi_t,$$

$$(\sigma_n \cdot \sigma_p) \chi_s = -3\chi_s.$$

Эти результаты будут полезны в следующей задаче.

Задача 140. Центральное взаимодействие между нуклонами, зависящее от спина

С разумной степенью точности взаимодействие нейтрона и протона в S -состоянии можно описать с помощью центральных сил, имеющих различную величину для симметричного и антисимметричного спиновых состояний. Выразить указанное взаимо-

действие через зависящий от спина потенциал, используя для этого

- а) обменный спиновый оператор Σ_{np} ,
- б) операторы спина σ_n и σ_p нейтрона и протона.

Решение. Центральное взаимодействие означает, что энергия взаимодействия зависит только от расстояния r между двумя частицами. Эта энергия должна быть различной в состояниях с разной спиновой симметрией, например $V_t(r)$ в триплетном состоянии, когда спины параллельны, и $V_s(r)$ в синглетном состоянии, когда спины антипараллельны.

а. Пусть $\chi(s_n, s_p)$ — двухчастичная функция. Определим обменный спиновый оператор с помощью равенства

$$\Sigma_{np}\chi(s_n, s_p) = \chi(s_p, s_n). \quad (140.1)$$

Для симметричного триплетного состояния

$$\chi_t(s_n, s_p) = \chi_t(s_p, s_n),$$

поэтому

$$\Sigma_{np}\chi_t = \chi_t. \quad (140.2a)$$

С другой стороны, для антисимметричного синглетного состояния

$$\chi_s(s_n, s_p) = -\chi_s(s_p, s_n)$$

и, следовательно,

$$\Sigma_{np}\chi_s = -\chi_s. \quad (140.2b)$$

Таким образом, оба типа функций являются собственными функциями обменного оператора и принадлежат соответственно собственным значениям $+1$ и -1 . Так как три триплетные и одна синглетная функции образуют полный набор, то равенства (140.2a) и (140.2b) определяют обменный оператор полностью и притом единственным образом.

Если теперь определить энергию взаимодействия выражением вида

$$V = V_1(r) + V_2(r) \Sigma_{np},$$

то, согласно (140.2a) и (140.2b), должны выполняться равенства

$$V\chi_t = (V_1 + V_2)\chi_t \quad \text{и} \quad V\chi_s = (V_1 - V_2)\chi_s,$$

поэтому, выражения

$$V_t = V_1 + V_2 \quad \text{и} \quad V_s = V_1 - V_2$$

будут описывать энергию взаимодействия соответственно в триплетном и синглетном состояниях. Отсюда следует

$$V = \frac{1}{2}(V_t + V_s) + \frac{1}{2}(V_t - V_s) \Sigma_{np}. \quad (140.3)$$

6. В конце предыдущей задачи мы показали, что спиновые функции χ_t и χ_s являются собственными функциями оператора $(\sigma_n \cdot \sigma_p)$, причем

$$(\sigma_n \cdot \sigma_p) \chi_t = \chi_t, \quad (\sigma_n \cdot \sigma_p) \chi_s = -3\chi_s. \quad (140.4)$$

Отсюда следует, что оператор Σ_{np} линейным образом выражается через оператор $(\sigma_n \cdot \sigma_p)$. В самом деле, положив

$$\Sigma_{np} = \frac{1}{2} (1 + (\sigma_n \cdot \sigma_p)), \quad (140.5)$$

мы убеждаемся, что такой выбор обеспечивает выполнение равенств (140.2a) и (140.2б). Поскольку, далее, не существует других спиновых функций двухнуклонной системы, то оба оператора полностью определяются равенствами (140.2a), (140.2б) и (140.4), поэтому соотношение (140.5) обладает всей возможной степенью общности.

Исключая с помощью (140.5) оператор Σ_{np} из равенства (140.3), окончательно получаем

$$V = \frac{1}{4} (3V_t + V_s) + \frac{1}{4} (V_t - V_s) (\sigma_n \cdot \sigma_p). \quad (140.6)$$

Задача 141. Степени спиновых операторов

Показать, что оператор $(\sigma_1 \cdot \sigma_2)^n$, где σ_1 и σ_2 — спиновые операторы частицы 1 и частицы 2, выражается линейно через оператор $(\sigma_1 \cdot \sigma_2)$.

Решение. Оператор $(\sigma_1 \cdot \sigma_2)$ полностью описывается равенствами

$$(\sigma_1 \cdot \sigma_2) \chi_t = \chi_t, \quad (\sigma_1 \cdot \sigma_2) \chi_s = -3\chi_s, \quad (141.1)$$

демонстрирующими его действие на три триплетные и одну синглетную функции, поскольку они образуют полный ортонормированный набор функций. Таким образом, нам достаточно рассмотреть действие оператора $(\sigma_1 \cdot \sigma_2)^n$ на функции указанного полного набора. Повторное применение оператора $(\sigma_1 \cdot \sigma_2)$ к обеим частям равенств (141.1) немедленно дает

$$(\sigma_1 \cdot \sigma_2)^n \chi_t = \chi_t, \quad (\sigma_1 \cdot \sigma_2)^n \chi_s = (-3)^n \chi_s. \quad (141.2)$$

Отсюда следует, что оператор $(\sigma_1 \cdot \sigma_2)^n$ линейно выражается через оператор $(\sigma_1 \cdot \sigma_2)$:

$$(\sigma_1 \cdot \sigma_2)^n = A + B (\sigma_1 \cdot \sigma_2). \quad (141.3)$$

Подставляя выражение (141.3) в равенства (141.2) и учитывая (141.1), находим

$$(A + B) \chi_t = \chi_t, \quad (A - 3B) \chi_s = (-3)^n \chi_s.$$

Отсюда следует

$$A + B = 1, \quad A - 3B = (-3)^n,$$

или

$$A = \frac{1}{4} [3 + (-3)^n], \quad B = \frac{1}{4} [1 - (-3)^n]. \quad (141.4)$$

Таким образом, мы, например, имеем

$$\begin{aligned} (\sigma_1 \cdot \sigma_2)^2 &= 3 - 2(\sigma_1 \cdot \sigma_2), \\ (\sigma_1 \cdot \sigma_2)^3 &= -6 + 7(\sigma_1 \cdot \sigma_2). \end{aligned}$$

Замечание. Представление энергии взаимодействия, зависящего от спина, в виде (140.6) в предыдущей задаче действительно является единственным, так как замена выражения (140.6) рядом по степеням $(\sigma_n \cdot \sigma_p)$ не может изменить окончательного результата. Решение задачи выглядело бы еще проще, если бы мы рассматривали ряд по степеням обменного оператора Σ_{12} .

Задача 142. Собственные функции оператора полного момента двух частиц, обладающих спином

Найти собственные функции операторов J_z и J^2 , описывающие триплетные состояния системы двух частиц, обладающих спином $1/2$. Используйте $\hbar = 1$ как единицу момента количества движения.

Решение. Любую функцию триплетного состояния, разумеется, можно записать в виде

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} \{f_l(r) Y_{l,m-1} \chi_{1,1} + g_l(r) Y_{l,m} \chi_{1,0} + h_l(r) Y_{l,m+1} \chi_{1,-1}\}. \quad (142.1)$$

В этом выражении каждая из трех возможных спиновых функций умножается на функцию пространственных координат, формально записанную в виде разложения по сферическим гармоникам. Вторые индексы сферических гармоник Y выбраны таким образом, чтобы имело место равенство

$$J_z \psi = m \psi, \quad (142.2)$$

т. е. чтобы функция ψ была собственной функцией оператора J_z .

Рассмотрим теперь действие оператора

$$J^2 = \left\{ L + \frac{1}{2} (\sigma_1 + \sigma_2) \right\}^2 = L^2 + L \cdot (\sigma_1 + \sigma_2) + \frac{1}{4} [6 + 2(\sigma_1 \cdot \sigma_2)]$$

на функцию (142.1). С этой целью удобно ввести операторы

$$\sigma_+ = \sigma_x + i\sigma_y \quad \text{и} \quad \sigma_- = \sigma_x - i\sigma_y, \quad (142.3)$$

аналогичные (см. задачу 56) операторам

$$L_+ = L_x + iL_y \quad \text{и} \quad L_- = L_x - iL_y. \quad (142.4)$$

Тогда оператор J^2 можно записать в виде

$$J^2 = L^2 + \frac{1}{2}(L_+ \sigma_- + L_- \sigma_+) + L_z \sigma_z + \frac{3}{2} + \frac{1}{2}(\sigma_1 \cdot \sigma_2), \quad (142.5)$$

где

$$\sigma_{\pm} = \sigma_{1\pm} + \sigma_{2\pm} \quad \text{и} \quad \sigma_z = \sigma_{1z} + \sigma_{2z}.$$

Действие этих операторов на триплетные спиновые функции дает

$$\begin{aligned} \sigma_+ \begin{pmatrix} \chi_{1,1} \\ \chi_{1,0} \\ \chi_{1,-1} \end{pmatrix} &= 2\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_{1,1} \\ \chi_{1,0} \end{pmatrix}, \\ \sigma_- \begin{pmatrix} \chi_{1,1} \\ \chi_{1,0} \\ \chi_{1,-1} \end{pmatrix} &= 2\sqrt{2} \begin{pmatrix} \chi_{1,0} \\ \chi_{1,-1} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z \begin{pmatrix} \chi_{1,1} \\ \chi_{1,0} \\ \chi_{1,-1} \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} \chi_{1,1} \\ 0 \\ -\chi_{1,-1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (142.6)$$

Теперь, непосредственно вычисляя, получаем

$$\begin{aligned} J^2 \chi_{1,1} &= (L^2 + 2 + 2L_z) \chi_{1,1} + \sqrt{2} L_+ \chi_{1,0}, \\ J^2 \chi_{1,0} &= \sqrt{2} L_- \chi_{1,1} + (L^2 + 2) \chi_{1,0} + \sqrt{2} L_+ \chi_{1,-1}, \\ J^2 \chi_{1,-1} &= \sqrt{2} L_- \chi_{1,0} + (L^2 + 2 - 2L_z) \chi_{1,-1}. \end{aligned} \quad (142.7)$$

Используя эти формулы, а также хорошо известные соотношения (см. задачу 56)

$$\begin{aligned} L_+ Y_{l,m} &= -\sqrt{(l+m+1)(l-m)} Y_{l,m+1}, \\ L_- Y_{l,m} &= -\sqrt{(l+m)(l-m+1)} Y_{l,m-1}, \\ L_z Y_{l,m} &= m Y_{l,m}, \end{aligned} \quad (142.8)$$

нетрудно показать, что

$$\begin{aligned} J^2 \psi &= \sum_{l=0}^{\infty} \{ [f_l(l(l+1)+2m) - g_l \sqrt{2(l+m)(l-m+1)}] \times \\ &\quad \times Y_{l,m-1} \chi_{1,1} + [-f_l \sqrt{2(l+m)(l-m+1)} + \\ &\quad + g_l(l(l+1)+2) - h_l \sqrt{2(l+m+1)(l-m)}] Y_{l,m} \chi_{1,0} + \\ &\quad + [-g_l \sqrt{2(l+m+1)(l-m)} + n_l(l(l+1)-2m)] Y_{l,m+1} \chi_{1,-1} \}. \end{aligned} \quad (142.9)$$

Чтобы функция ψ была собственной функцией оператора J^2 , последнее выражение должно равняться $j(j+1)\psi$. Отсюда для функций f_l , g_l , h_l получается три независимых линейных уравнения. Это говорит о том, что три радиальные функции должны иметь одинаковый вид и различаться лишь амплитудами:

$$f_l = A_l F_l(r), \quad g_l = B_l F_l(r), \quad h_l = C_l F_l(r). \quad (142.10)$$

Постоянные амплитуды A_l , B_l , C_l можно найти из следующей системы линейных уравнений:

$$\begin{aligned} [l(l+1) + 2m - j(j+1)] A_l - \sqrt{2(l+m)(l-m+1)} B_l &= 0, \\ -\sqrt{2(l+m)(l-m+1)} A_l + [l(l+1) + 2 - j(j+1)] B_l - \\ - \sqrt{2(l+m+1)(l-m)} C_l &= 0, \\ -\sqrt{2(l+m+1)(l-m)} B_l + [l(l+1) - 2m - j(j+1)] C_l &= 0. \end{aligned} \quad (142.11)$$

Определитель этой системы должен обращаться в нуль. Отсюда после элементарных преобразований получается уравнение для определения j , не содержащее квантового числа m ,

$$\begin{aligned} [l(l+1) - j(j+1)] \{ [l(l+1) - j(j+1)]^2 + \\ + 2 [l(l+1) - j(j+1)] - 4l(l+1) \} = 0. \end{aligned}$$

Оно имеет три (положительных) корня:

$$j = l + 1, \quad j = l, \quad j = l - 1; \quad (142.12)$$

для каждого из этих корней амплитуды A_l , B_l , C_l теперь находятся с точностью до общего постоянного множителя из уравнений (142.11). Ниже в таблице приводятся окончательные результаты, полученные при произвольном предположении, что условие нормировки имеет вид

$$A_l^2 + B_l^2 + C_l^2 = 1. \quad (142.13)$$

l	A_l	B_l	C_l
$l+1$	$-\sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m)}{2(l+1)(2l+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(l+1)(2l+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m)}{2(l+1)(2l-m)}}$
l	$\sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m)}{2l(l+1)}}$	$\frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m)}{2l(l+1)}}$
$l-1$	$\sqrt{\frac{(l-m+1)(l-m)}{2l(2l+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{l(2l+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m)}{2l(2l+1)}}$

Задача 143. Тензорные силы

Так называемые тензорные силы, действующие между частицами 1 и 2, обладающими спином $1/2$, определяются оператором энергии взаимодействия вида

$$V = \mathcal{W}(r) T_{12},$$

где

$$T_{12} = \frac{(\sigma_1 \cdot r)(\sigma_2 \cdot r)}{r^2} - \frac{1}{3}(\sigma_1 \cdot \sigma_2). \quad (143.1)$$

Рассмотреть действие этого оператора на спиновые собственные функции двухчастичной системы.

Решение. Оператор T_{12} инвариантен относительно операции обмена спинами. Следовательно, при действии этого оператора симметрия спиновых функций не изменяется. Так как имеется только одна антисимметричная спиновая функция, $\chi_{0,0}$, то она должна быть собственной функцией оператора T_{12} . Однако этот оператор, вообще говоря, может смешивать состояния, описываемые тремя симметричными спиновыми функциями. Далее, оператор T_{12} инвариантен по отношению к обмену пространственными координатами частиц, другими словами, по отношению к пространственной инверсии, поэтому при действии этого оператора сохраняется четность состояния. Это означает, что выражение $T_{12}\chi$ содержит сферические гармоники только четного порядка. Более того, можно ожидать, что вклад будут давать лишь состояния, для которых орбитальный момент l не превышает двух.

Чтобы разобраться в деталях расчета, рассмотрим прежде всего действие одночастичного оператора $(\sigma \cdot r)$ на одночастичные спиновые функции:

$$(\sigma \cdot r) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = (\sigma_x x + \sigma_y y + \sigma_z z) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (x + iy) \beta + z \alpha \\ (x - iy) \alpha - z \beta \end{pmatrix}. \quad (143.2)$$

Отсюда непосредственно следует

$$(\sigma_1 \cdot r) (\sigma_2 \cdot r) \begin{pmatrix} \alpha_1 \alpha_2 \\ \alpha_1 \beta_2 \\ \beta_1 \alpha_2 \\ \beta_1 \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} [(x + iy) \beta_1 + z \alpha_1] [(x + iy) \beta_2 + z \alpha_2] \\ [(x + iy) \beta_1 + z \alpha_1] [(x - iy) \alpha_2 - z \beta_2] \\ [(x - iy) \alpha_1 - z \beta_1] [(x + iy) \beta_2 + z \alpha_2] \\ [(x - iy) \alpha_1 - z \beta_1] [(x - iy) \alpha_2 - z \beta_2] \end{pmatrix}.$$

Принимая во внимание равенства

$$\begin{aligned} (x \pm iy)^2 &= r^2 \sin^2 \vartheta e^{\pm 2i\varphi}, & x^2 + y^2 &= r^2 \sin^2 \vartheta, \\ (x \pm iy) z &= r^2 \sin \vartheta \cos \vartheta e^{\pm i\varphi}, & z^2 &= r^2 \cos^2 \vartheta, \end{aligned}$$

можно теперь написать

$$\begin{aligned} & \frac{(\sigma_1 \cdot r) (\sigma_2 \cdot r)}{r^2} \begin{pmatrix} \alpha_1 \alpha_2 \\ \alpha_1 \beta_2 \\ \beta_1 \alpha_2 \\ \beta_1 \beta_2 \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} \cos^2 \vartheta \alpha_1 \alpha_2 + \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi} (\alpha_1 \beta_2 + \beta_1 \alpha_2) + \sin^2 \vartheta e^{2i\varphi} \beta_1 \beta_2 \\ \sin \vartheta \cos \vartheta e^{-i\varphi} \alpha_1 \alpha_2 - \cos^2 \vartheta \alpha_1 \beta_2 + \sin^2 \vartheta \beta_1 \alpha_2 - \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi} \beta_1 \beta_2 \\ \sin \vartheta \cos \vartheta e^{-i\varphi} \alpha_1 \alpha_2 + \sin^2 \vartheta \alpha_1 \beta_2 - \cos^2 \vartheta \beta_1 \alpha_2 - \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi} \beta_1 \beta_2 \\ \sin^2 \vartheta e^{-2i\varphi} \alpha_1 \alpha_2 - \sin \vartheta \cos \vartheta e^{-i\varphi} (\alpha_1 \beta_2 + \beta_1 \alpha_2) + \cos^2 \vartheta \beta_1 \beta_2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Для дальнейшего удобно ввести обозначение χ_{s, m_s} , а именно для триплетных функций

$$\begin{aligned} \alpha_1 \alpha_2 &= \chi_{1, 1}, \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1 \beta_2 + \beta_1 \alpha_2) &= \chi_{1, 0}, \\ \beta_1 \beta_2 &= \chi_{1, -1} \end{aligned} \quad (143.3)$$

и для синглетной функции

$$\chi_{0, 0} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1 \beta_2 - \beta_1 \alpha_2). \quad (143.4)$$

В этих обозначениях для симметричных триплетных функций имеем

$$\begin{aligned} & \frac{(\sigma_1 \cdot r)(\sigma_2 \cdot r)}{r^2} \begin{pmatrix} \chi_{1, 1} \\ \chi_{1, 0} \\ \chi_{1, -1} \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} \cos^2 \vartheta \chi_{1, 1} + \sqrt{2} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi} \chi_{1, 0} + \sin^2 \vartheta e^{2i\varphi} \chi_{1, -1} \\ \sqrt{2} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{-i\varphi} \chi_{1, 1} + (\sin^2 \vartheta - \cos^2 \vartheta) \chi_{1, 0} - \\ - \sqrt{2} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\varphi} \chi_{1, -1} \\ \sin^2 \vartheta e^{-2i\varphi} \chi_{1, 1} - \sqrt{2} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{-i\varphi} \chi_{1, 0} + \cos^2 \vartheta \chi_{1, -1} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (143.5)$$

а для антисимметричной синглетной функции получаем

$$\frac{(\sigma_1 \cdot r)(\sigma_2 \cdot r)}{r^2} \chi_{0, 0} = -\chi_{0, 0}. \quad (143.6)$$

Второе слагаемое в операторе T_{12} уже рассматривалось в задаче 140. Согласно полученным там результатам,

$$(\sigma_1 \cdot \sigma_2) \begin{pmatrix} \chi_{1, m_s} \\ \chi_{0, 0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_{1, m_s} \\ -3\chi_{0, 0} \end{pmatrix}. \quad (143.7)$$

Комбинируя теперь равенства (143.6) и (143.7), мы сразу же находим

$$T_{12} \chi_{0, 0} = 0. \quad (143.8)$$

Таким образом, тензорные силы не дают динамического вклада в синглетное спиновое состояние.

Теперь нам остается обсудить вопрос о триплетных состояниях. Вводя нормированные сферические функции в соответствии с определениями, приведенными в задаче 67, с помощью

равенств (143.5) и (143.7) можно получить

$$\begin{aligned} T_{12}\chi_{1,1} &= \frac{2}{3} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} (Y_{2,0}\chi_{1,1} + \sqrt{3}Y_{2,1}\chi_{1,0} + \sqrt{6}Y_{2,2}\chi_{1,-1}), \\ T_{12}\chi_{1,0} &= \frac{2}{3} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} (-\sqrt{3}Y_{2,-1}\chi_{1,1} - 2Y_{2,0}\chi_{1,0} - \sqrt{3}Y_{2,1}\chi_{1,-1}), \\ T_{12}\chi_{1,-1} &= \frac{2}{3} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} (\sqrt{6}Y_{2,-2}\chi_{1,1} + \sqrt{3}Y_{2,-1}\chi_{1,0} + Y_{2,0}\chi_{1,-1}). \end{aligned} \quad (143.9)$$

Эти формулы показывают, что при действии оператора T_{12} наряду с четностью и обменной спиновой симметрией сохраняется и z -компонента полного момента. Однако орбитальный момент, так же как и его z -компонента, не являются хорошими квантовыми числами в двухчастичной системе с тензорным взаимодействием.

Задача 144. Дейтрон с тензорным взаимодействием

Предположим, что взаимодействие между протоном и нейтроном обусловлено центральными и тензорными силами, т. е.

$$V = V_c(r) + V_t(r) T_{pn}, \quad (144.1)$$

тогда основное состояние дейтрона должно быть смесью S - и D -состояний. Найти общее выражение волновой функции основного состояния дейтрона и получить для радиальных функций S - и D -состояний систему двух дифференциальных уравнений. Считать, что спин дейтрона направлен по оси z .

Решение. Спин дейтрона и его проекция на ось z равны единице (в единицах \hbar), поэтому наиболее общая суперпозиция S - и D -состояний должна иметь вид

$$\psi = f(r) Y_{0,0}\chi_{1,1} + g(r) \{Y_{2,0}\chi_{1,1} + \lambda Y_{2,1}\chi_{1,0} + \mu Y_{2,2}\chi_{1,-1}\}, \quad (144.2)$$

причем постоянные λ и μ выбираются таким образом, чтобы выполнялось равенство

$$I^2\psi = 2\psi, \quad (144.3)$$

где I — оператор полного момента количества движения (спин дейтрона). Согласно результатам предыдущей задачи, имеем

$$\begin{aligned} I^2\psi &= \{\chi_{1,1}(L^2 + 2 + 2L_z) + \chi_{1,0}\sqrt{2}L_+\} (fY_{0,0} + gY_{2,0}) + \\ &+ \lambda \{\chi_{1,1}\sqrt{2}L_- + \chi_{1,0}(L^2 + 2) + \chi_{1,-1}\sqrt{2}L_+\} gY_{2,1} + \\ &+ \mu \{\chi_{1,0}\sqrt{2}L_- + \chi_{1,-1}(L^2 + 2 - 2L_z)\} gY_{2,2} \end{aligned}$$

и, следовательно,

$$I^2\psi = \chi_{1,1} [2fV_{0,0} + (8 - 2\sqrt{3}\lambda) gY_{2,0}] + \chi_{1,0} (-2\sqrt{3} + 8\lambda - 2\sqrt{2}\mu) gY_{2,1} + \chi_{1,-1} (-2\sqrt{2}\lambda + 4\mu) gY_{2,2}.$$

Последнее равенство переходит в равенство (144.3), если положить

$$\lambda = \sqrt{3}, \quad \mu = \sqrt{6}, \quad (144.4)$$

поэтому интересующая нас собственная функция полного момента принимает вид

$$\psi = f(r) Y_{0,0} \chi_{1,1} + g(r) \{Y_{2,0} \chi_{1,1} + \sqrt{3} Y_{2,1} \chi_{1,0} + \sqrt{6} Y_{2,2} \chi_{1,-1}\}. \quad (144.5)$$

Выражение, стоящее в фигурных скобках в равенстве (144.5), в точности совпадает с одной из комбинаций сферических гармоник и спиновых функций, полученных нами в предыдущей задаче [см. первую из формул (143.9)], поэтому мы можем записать нашу волновую функцию в более компактном виде:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left\{ f(r) + \frac{3}{2} \sqrt{5} g(r) T_{pn} \right\} \chi_{1,1}. \quad (144.6)$$

Займемся теперь условием нормировки. Из равенства (144.5) непосредственно следует

$$\int_0^{\infty} r^2 (f^2 + 10g^2) dr = 1.$$

Для дальнейшего удобно перейти к новым радиальным функциям, положив

$$f(r) = \psi_S(r) \cos \omega, \quad g(r) = \frac{1}{\sqrt{10}} \psi_D(r) \sin \omega, \quad (144.7)$$

при этом имеем

$$\int_0^{\infty} \psi_S^2 r^2 dr = 1, \quad \int_0^{\infty} \psi_D^2 r^2 dr = 1 \quad (144.8)$$

и

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left\{ \psi_S(r) \cos \omega + \frac{3}{2} \frac{\psi_D(r) \sin \omega}{\sqrt{2}} T_{pn} \right\} \chi_{1,1}. \quad (144.9)$$

Функция (144.9) должна удовлетворять уравнению Шредингера для относительного движения (мы полагаем $\hbar=1$, $m_p = m_n = 1$, приведенная масса равна $1/2$, см. задачу 150):

$$(-\nabla^2 + V_c + V_t T_{pn} - E) \psi = 0.$$

Таким образом, получаем

$$\left\{ (-\nabla^2 + V_c - E) \cos \omega \psi_S + \left[\frac{3}{2\sqrt{2}} (-\nabla^2 + V_c - E) \times \right. \right. \\ \left. \left. \times \sin \omega \psi_D + V_t \cos \omega \psi_S \right] T_{pn} + \frac{3}{2\sqrt{2}} V_t \sin \omega \psi_D T_{pn}^2 \right\} \chi_{1,1} = 0. \quad (144.10)$$

Оператор T_{pn}^2 , если он действует на триплетную спиновую функцию χ_t , можно линейным образом выразить через оператор T_{pn} :

$$T_{pn}^2 \chi_t = \left(\frac{8}{9} - \frac{2}{3} T_{pn} \right) \chi_t. \quad (144.11)$$

В этом нетрудно убедиться, воспользовавшись справедливым для одночастичных спиновых состояний тождеством

$$S \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{r} (\sigma \cdot r) \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta e^{i\varphi} \\ \sin \vartheta e^{-i\varphi} & -\cos \vartheta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.$$

Отсюда следует, что $S^2 = 1$, и поэтому

$$S_{pn}^2 = \left\{ \frac{1}{r^2} (\sigma_p \cdot r) (\sigma_n \cdot r) \right\}^2 = 1.$$

Кроме того, мы уже знаем, что $(\sigma_p \cdot \sigma_n) \chi_t = \chi_t$ (см. стр. 36), следовательно, в полном согласии с (144.11) имеем

$$T_{pn}^2 = \left(S_{pn} - \frac{1}{3} \right)^2 = 1 - \frac{2}{3} S_{pn} + \frac{10}{9} = \frac{10}{9} - \frac{2}{3} \left(T_{pn} + \frac{1}{3} \right).$$

Теперь уравнение (144.10) можно записать в следующем виде:

$$\left\{ \cos \omega (-\nabla^2 + V_c - E) \psi_S + \frac{2\sqrt{2}}{3} \sin \omega V_t \psi_D \right\} \chi_{1,1} + \\ + \left\{ \sin \omega \left[\frac{3}{2\sqrt{2}} (-\nabla^2 + V_c - E) - \frac{1}{\sqrt{2}} V_t \right] \psi_D + \right. \\ \left. + \cos \omega V_t \psi_S \right\} T_{pn} \chi_{1,1} = 0. \quad (144.12)$$

Оператор T_{pn} , стоящий здесь после второй фигурной скобки и действующий на функцию $\chi_{1,1}$, порождает только члены с $l=2$, ортогональные членам с $l=0$, собранным в первой скобке, что позволяет разбить уравнение (144.12) на два отдельных радиальных уравнения:

$$\cos \omega \left[\psi_S'' + \frac{2}{r} \psi_S' + (E - V_c) \psi_S \right] - \sin \omega \cdot \frac{2\sqrt{2}}{3} V_t \psi_D = 0 \quad (144.13)$$

и

$$\sin \omega \left[\psi_D'' + \frac{2}{r} \psi_D' - \frac{6}{r^2} \psi_D + \left(E - V_c + \frac{2}{3} V_t \right) \psi_D \right] - \\ - \cos \omega \cdot \frac{2\sqrt{2}}{3} V_t \psi_S = 0. \quad (144.14)$$

Это и есть искомая система дифференциальных уравнений.

Задача 145. Электрический квадрупольный и магнитный дипольный моменты дейтрона

Считая заданной волновую функцию дейтрона, определенную в предыдущей задаче,

а) вычислить электрический квадрупольный момент дейтрона и выразить его через интегралы

$$A = \int_0^{\infty} \psi_S \psi_D r^4 dr, \quad B = \int_0^{\infty} \psi_D^2 r^4 dr; \quad (145.1)$$

б) найти среднее значение магнитного дипольного момента дейтрона.

Решение

а. Тензор квадрупольного момента (см. задачу 61) в данном случае имеет вид

$$Q_{ik} = \frac{1}{4} (3x_i x_k - r^2 \delta_{ik}).$$

В первоначальное определение этого тензора множитель $1/4$ не входил. Появление его здесь объясняется следующим. Так как нейтрон не несет электрического заряда, то вклад в квадрупольный момент дейтрона дает лишь один протон, радиус-вектор которого относительно центра масс равен $1/2 r$. У дейтрона в состоянии с $M_I = 1$ распределение заряда аксиально симметрично относительно оси z , поэтому усреднение компонент тензора квадрупольного момента по углу φ приводит к соотношениям

$$\bar{Q}_{xy} = \bar{Q}_{yz} = \bar{Q}_{zx} = 0, \quad \bar{Q}_{xx} = \bar{Q}_{yy} = -\frac{1}{2} \bar{Q}_{zz}. \quad (145.2)$$

Следовательно, нам необходимо вычислить лишь среднее значение оператора Q_{zz} , которое определяется формулой

$$\begin{aligned} \langle Q_{zz} \rangle &= \int Q_{zz} |\psi|^2 d\tau = \frac{1}{4} \int r^2 (3 \cos^2 \vartheta - 1) |\psi|^2 d\tau = \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \int r^2 Y_{2,0} |\psi|^2 d\tau. \end{aligned} \quad (145.3)$$

Подставляя сюда волновую функцию дейтрона, найденную в предыдущей задаче,

$$\begin{aligned} \psi &= \cos \omega \psi_S(r) Y_{0,0} \chi_{1,1} + \\ &+ \sin \omega \frac{1}{\sqrt{10}} \psi_D(r) \{ Y_{2,0} \chi_{1,1} + \sqrt{3} Y_{2,1} \chi_{1,0} + \sqrt{6} Y_{2,2} \chi_{1,-1} \}, \end{aligned} \quad (145.4)$$

и учитывая ортонормированность спиновых функций, получаем

$$\langle Q_{zz} \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4\pi}{5}} \int_0^\infty dr r^4 \oint Y_{2,0} \left\{ \left| \cos \omega \psi_S Y_{0,0} + \sin \omega \frac{\psi_D}{\sqrt{10}} Y_{2,0} \right|^2 + \right. \\ \left. + \sin^2 \omega \frac{\psi_D^2}{10} (3 |Y_{2,1}|^2 + 6 |Y_{2,2}|^2) \right\} d\Omega.$$

В этом выражении член, содержащий ψ_S^2 , исчезает благодаря ортогональности сферических функций. С произведением $\psi_S \psi_D$ связан тривиальный интеграл

$$\oint Y_{0,0} |Y_{2,0}|^2 d\Omega = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}.$$

Несколько труднее вычислить три оставшихся интеграла, связанных с ψ_D^2 . Мы приводим лишь окончательные результаты:

$$\begin{aligned} \oint Y_{2,0} |Y_{2,0}|^2 d\Omega &= \frac{2}{7} \sqrt{\frac{5}{4\pi}}, \\ \oint Y_{2,0} |Y_{2,1}|^2 d\Omega &= \frac{1}{7} \sqrt{\frac{5}{4\pi}}, \\ \oint Y_{2,0} |Y_{2,2}|^2 d\Omega &= -\frac{2}{7} \sqrt{\frac{5}{4\pi}}. \end{aligned} \quad (145.5)$$

Собирая вместе все эти соотношения, приходим к следующей простой формуле:

$$\langle Q_{zz} \rangle = \frac{1}{5\sqrt{2}} A \cos \omega \sin \omega - \frac{1}{20} B \sin^2 \omega. \quad (145.6)$$

Если в процентном отношении примесь D -состояния к S -состоянию мала, то малым будет и параметр ω . В таком случае второй отрицательный член в формуле (145.6) будет играть роль малой поправки по отношению к положительному первому члену и величина $\langle Q_{zz} \rangle$ окажется положительной. Это означает, что дейтрон обладает вытянутой формой вдоль оси z . Последний вывод подтверждается экспериментом.

б. Магнитный дипольный момент складывается из спиновой части, $\mu_p \sigma_{pz} + \mu_n \sigma_{nz}$, и из орбитальной части, вклад в которую, разумеется, дает только один протон. Компонента орбитального момента L_z для рассматриваемой двухчастичной системы дается выражением

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi_p} + \frac{\partial}{\partial \varphi_n} \right);$$

оба слагаемых этой компоненты вносят одинаковый вклад в ор-

битальный момент относительно центра масс. В магнитный же момент вклад дает только первое слагаемое, поэтому в выражение для магнитного момента оператор L_z войдет с множителем $1/2$:

$$\mu_{орб} = \frac{e}{2mc} \cdot \frac{1}{2} L_z.$$

Среднее значение z -компоненты магнитного момента определяется формулой

$$\langle \mu \rangle = \int \psi^\dagger (\mu_p \sigma_{pz} + \mu_n \sigma_{nz} + \mu_{орб}) \psi d\tau, \quad (145.7)$$

средние же значения двух других компонент равны нулю.

Применяя операторы σ_{pz} и σ_{nz} к триплетным спиновым функциям, получаем соотношения

$$\begin{aligned} \sigma_{pz} \chi_{1,1} &= \chi_{1,1}, & \sigma_{nz} \chi_{1,1} &= \chi_{1,1}, \\ \sigma_{pz} \chi_{1,0} &= \chi_{0,0}, & \sigma_{nz} \chi_{1,0} &= -\chi_{0,0}, \\ \sigma_{pz} \chi_{1,-1} &= -\chi_{1,-1}, & \sigma_{nz} \chi_{1,-1} &= -\chi_{1,-1}. \end{aligned} \quad (145.8)$$

Поэтому, кратко записав дейтронную волновую функцию в виде

$$\psi = u \chi_{1,1} + v \chi_{1,0} + w \chi_{1,-1},$$

получаем

$$\langle \mu \rangle = \int (u^* \chi_{1,1}^\dagger + v^* \chi_{1,0}^\dagger + w^* \chi_{1,-1}^\dagger) \{ \mu_p (u \chi_{1,1} + v \chi_{0,0} - w \chi_{1,-1}) + \mu_n (u \chi_{1,1} - v \chi_{0,0} - w \chi_{1,-1}) + \mu_{орб} (u \chi_{1,1} + v \chi_{1,0} + w \chi_{1,-1}) \} d\tau.$$

С учетом ортонормированности спиновых функций последнее выражение принимает вид

$$\langle \mu \rangle = \int \{ u^* (\mu_p + \mu_n + \mu_{орб}) u + v^* \mu_{орб} v + w^* (-\mu_p - \mu_n + \mu_{орб}) w \} d\tau.$$

Далее [см. формулу (144.5)] имеем

$$u = f Y_{0,0} + g Y_{2,0}, \quad v = \sqrt{3} g Y_{2,1}, \quad w = \sqrt{6} g Y_{2,2},$$

поэтому

$$L_z u = 0, \quad L_z v = \hbar v, \quad L_z w = 2\hbar w$$

и, следовательно,

$$\begin{aligned} \langle \mu \rangle &= \int \left\{ (\mu_p + \mu_n) (u^* u - w^* w) + \frac{e\hbar}{4mc} (v^* v + 2w^* w) \right\} d\tau = \\ &= (\mu_p + \mu_n) \int_0^\infty r^2 (f^2 + g^2 - 6g^2) dr + \frac{e\hbar}{4mc} \int_0^\infty r^2 (3g^2 + 2 \cdot 6g^2) dr. \end{aligned}$$

Заменяя в этом выражении функции f и g нормированными функциями ψ_S и ψ_D , согласно (144.7), и беря в качестве еди-

ницы ядерный магнетон, $e\hbar/(2mc)$, приходим к формуле

$$\langle \mu \rangle = (\mu_p + \mu_n) - \frac{3}{2} \sin^2 \omega \left(\mu_p + \mu_n - \frac{1}{2} \right). \quad (145.9)$$

Таким образом, поправка к магнитному моменту, обусловленная примесью D -состояния, оказывается второго порядка малости.

Задача 146. Спиновые функции трех частиц

Получить собственные функции операторов S_z и S^2 для системы трех частиц, обладающих спином $1/2$.

Решение. В данном случае оператор суммарного спина можно записать в виде

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2 + \boldsymbol{\sigma}_3). \quad (146.1)$$

Его z -компонента, очевидно, имеет следующие собственные функции:

$$\begin{aligned} \chi^{(3/2)} &= \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3, \\ \chi^{(1/2)} &= A \alpha_1 \alpha_2 \beta_3 + B \alpha_1 \beta_2 \alpha_3 + C \beta_1 \alpha_2 \alpha_3, \\ \chi^{(-1/2)} &= A' \beta_1 \beta_2 \alpha_3 + B' \beta_1 \alpha_2 \beta_3 + C' \alpha_1 \beta_2 \beta_3, \\ \chi^{(-3/2)} &= \beta_1 \beta_2 \beta_3. \end{aligned} \quad (146.2)$$

В качестве аргумента функции χ мы указываем соответствующее собственное значение оператора S_z в единицах \hbar . Собственные значения $1/2$ и $-1/2$ трехкратно вырождены. Чтобы устранить указанное вырождение, перейдем к рассмотрению оператора

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^2 &= \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2 (\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2 + \boldsymbol{\sigma}_3)^2 = \\ &= \left(\frac{\hbar}{2} \right)^2 \{9 + 2(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) + 2(\boldsymbol{\sigma}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma}_3) + 2(\boldsymbol{\sigma}_3 \cdot \boldsymbol{\sigma}_1)\}. \end{aligned} \quad (146.3)$$

В задаче 140 мы показали, что

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) \alpha_1 \alpha_2 &= \alpha_1 \alpha_2, & (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) \alpha_1 \beta_2 &= 2\beta_1 \alpha_2 - \alpha_1 \beta_2, \\ (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) \beta_1 \alpha_2 &= 2\alpha_1 \beta_2 - \beta_1 \alpha_2, & (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) \beta_1 \beta_2 &= \beta_1 \beta_2, \end{aligned}$$

или, более компактно, что оператор

$$\Sigma_{12} = \frac{1}{2} (1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) \quad (146.4)$$

просто взаимно заменяет спиновые состояния частиц 1 и 2:

$$\Sigma_{12} \chi(1, 2) = \chi(2, 1). \quad (146.5a)$$

Другими словами, мы имеем

$$\Sigma_{12} \alpha_1 \alpha_2 = \alpha_1 \alpha_2, \quad \Sigma_{12} \alpha_1 \beta_2 = \beta_1 \alpha_2 \text{ и т. д.} \quad (146.5b)$$

По этой причине оператор (146.4) называют *обменным спиновым оператором* для частиц 1 и 2.

Теперь мы можем выразить оператор (146.3) через такие обменные операторы:

$$\mathbf{S}^2 = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \{3 + 4(\Sigma_{12} + \Sigma_{23} + \Sigma_{31})\}. \quad (146.6)$$

Действие этого оператора на первую и четвертую спиновые функции сразу же дает

$$\mathbf{S}^2 \chi^{(3/2)} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \cdot 15 \chi^{(3/2)}, \quad \mathbf{S}^2 \chi^{(-3/2)} = \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \cdot 15 \chi^{(-3/2)}. \quad (146.7)$$

Таким образом, эти две функции уже сами по себе являются собственными функциями оператора \mathbf{S}^2 и принадлежат невырожденному собственному значению $S(S+1) = 15/4$, или $S = 3/2$. В векторной модели они соответствуют параллельной ориентации всех трех спинов по или против оси z .

Не так просто обстоит дело с функциями, принадлежащими вырожденным собственным значениям $1/2$ и $-1/2$. Действуя оператором (146.6) на функцию $\chi^{(1/2)}$, получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^2 \chi^{(1/2)} &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \{3\chi^{(1/2)} + \\ &\quad + 4[A\alpha_1\alpha_2\beta_3 + B\beta_1\alpha_2\alpha_3 + C\alpha_1\beta_2\alpha_3] + \\ &\quad + 4[A\alpha_1\beta_2\alpha_3 + B\alpha_1\alpha_2\beta_3 + C\beta_1\alpha_2\alpha_3] + \\ &\quad + 4[A\beta_1\alpha_2\alpha_3 + B\alpha_1\beta_2\alpha_3 + C\alpha_1\alpha_2\beta_3]\} = \\ &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \{(7A + 4B + 4C)\alpha_1\alpha_2\beta_3 + (4A + 7B + 4C)\alpha_1\beta_2\alpha_3 + \\ &\quad + (4A + 4B + 7C)\beta_1\alpha_2\alpha_3\}. \end{aligned}$$

С другой стороны,

$$\mathbf{S}^2 \chi^{(1/2)} = \hbar^2 S(S+1) \{A\alpha_1\alpha_2\beta_3 + B\alpha_1\beta_2\alpha_3 + C\beta_1\alpha_2\alpha_3\},$$

и мы приходим к системе трех линейных однородных уравнений:

$$\begin{aligned} 7A + 4B + 4C &= 4S(S+1)A, \\ 4A + 7B + 4C &= 4S(S+1)B, \\ 4A + 4B + 7C &= 4S(S+1)C. \end{aligned} \quad (146.8)$$

Условие обращения в нуль определителя этой системы дает нам кубическое уравнение для собственного значения $S(S+1)$. Решая это уравнение, находим

$$S(S+1) = \frac{15}{4}, \quad \frac{3}{4}, \quad \frac{3}{4}, \quad \text{или} \quad S = \frac{3}{2}, \quad \frac{1}{2}, \quad \frac{1}{2}. \quad (146.9)$$

Тот же результат получился бы у нас и при действии оператора \mathbf{S}^2 на функцию $\chi^{(-1/2)}$, только вместо буквы α всюду была бы буква β .

Для первого из собственных значений (146.9) решение системы (146.8) однозначно принимает вид $A = B = C$. Используя при записи спиновых функций более подробную символику $\chi(S, S_z)$, мы получаем следующий *квартет* четырех полностью симметричных функций:

$$\begin{aligned}\chi\left(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right) &= \alpha_1\alpha_2\alpha_3, \\ \chi\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\alpha_1\alpha_2\beta_3 + \alpha_1\beta_2\alpha_3 + \beta_1\alpha_2\alpha_3), \\ \chi\left(\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{\sqrt{3}}(\beta_1\beta_2\alpha_3 + \beta_1\alpha_2\beta_3 + \alpha_1\beta_2\beta_3), \\ \chi\left(\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right) &= \beta_1\beta_2\beta_3.\end{aligned}\tag{146.10}$$

Это решение соответствует в векторной модели четырем возможным ориентациям спина $3/2$. После подстановки двухкратного корня $S = 1/2$ в систему (146.8) все три ее уравнения приводят к одному и тому же соотношению:

$$A + B + C = 0,$$

что позволяет нам написать $C = -(A + B)$, но не дает никакой информации относительно A и B . Таким образом, имеем

$$\begin{aligned}\chi\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) &= A\alpha_1\alpha_2\beta_3 + B\alpha_1\beta_2\alpha_3 - (A + B)\beta_1\alpha_2\alpha_3, \\ \chi\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) &= A'\beta_1\beta_2\alpha_3 + B'\beta_1\alpha_2\beta_3 - (A' + B')\alpha_1\beta_2\beta_3.\end{aligned}\tag{146.11}$$

Эти формулы все еще описывают смесь двух различных дублетов, для каждого из которых $S = 1/2$.

Чтобы разделить указанные дублеты и снять оставшееся вырождение, обычно предполагают¹⁾, что

$$\text{либо } A = B = \frac{1}{\sqrt{6}}, \quad \text{либо } A = -B = \frac{1}{\sqrt{2}}.\tag{146.12}$$

В первом случае мы получаем дублет

$$\begin{aligned}\chi_1\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{\sqrt{6}}\{\alpha_1(\alpha_2\beta_3 + \beta_2\alpha_3) - 2\beta_1\alpha_2\alpha_3\}, \\ \chi_1\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{\sqrt{6}}\{\beta_1(\beta_2\alpha_3 + \alpha_2\beta_3) - 2\alpha_1\beta_2\beta_3\},\end{aligned}\tag{146.13}$$

¹⁾ Наличие вырождения связано с тем, что для трехчастичной системы операторы S^2 и S_z не образуют полного набора наблюдаемых. Чтобы иметь такой набор, надо присоединить к этим операторам один из обменных спиновых операторов Σ_{ik} . Волновые функции, приведенные в тексте, получаются в том случае, когда выбирается обменный оператор Σ_{23} . — *Прим. ред.*

симметричный по отношению к перестановке спинов частиц 2 и 3 (символически $1, \overline{23}$), а во втором случае — дублет

$$\begin{aligned}\chi_2\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \alpha_1 (\alpha_2 \beta_3 - \beta_2 \alpha_3), \\ \chi_2\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \beta_1 (\beta_2 \alpha_3 - \alpha_2 \beta_3),\end{aligned}\quad (146.14)$$

антисимметричный по отношению к перестановке спинов частиц 2 и 3 (символически $1, \overline{23}$). Требуя, чтобы именно для спинов частиц 2 и 3 имела место простая симметрия, мы, разумеется, поступаем совершенно произвольно. Другой выбор постоянных A и B , например $B = -1/2 A$, привел бы к спиновой функции с симметрией $\overline{12}, 3$. Только дополнительные условия, налагаемые на решение в той или иной конкретной задаче, могут снять это специфическое вырождение.

Задача 147. Рассеяние нейтронов молекулярным водородом

Пусть частицы 1 и 2 предыдущей задачи — это протоны, входящие в состав молекулы водорода, а частица 3 — медленный нейтрон с длиной волны де Бройля, значительно превышающей размеры молекулы. Определить сечение рассеяния нейтронов молекулами пара- и ортоводорода, считая, что *nr*-взаимодействие имеет центральный характер (см. задачу 140):

$$V = \frac{1}{4} (3V_t + V_s) + \frac{1}{4} (V_t - V_s) (\sigma_n \cdot \sigma_p). \quad (147.1)$$

Чтобы связать длины рассеяния с потенциалами, в качестве грубого приближения предположите, что длина рассеяния пропорциональна глубине потенциальной ямы.

Решение. Характер движения нейтрона определяется его взаимодействием с двумя протонами. Если длина волны нейтрона велика, то практически оба протона расположены в одном месте и для описания движения достаточно одной относительной координаты r . Будем обозначать нейтрон индексом n (вместо индекса 3), тогда взаимодействие нейтрона с молекулой водорода, согласно (147.1), можно записать в виде

$$V = \frac{1}{2} (3V_t + V_s) + \frac{1}{4} (V_t - V_s) (\sigma_n \cdot (\sigma_1 + \sigma_2)), \quad (147.2)$$

где

$$V_t = V_t(r) \quad \text{и} \quad V_s = V_s(r).$$

Ортоводород и параводород характеризуются соответственно симметричной и антисимметричной спиновыми функциями, по-

этому в нашей трехчастичной проблеме, согласно результатам предыдущей задачи, имеются следующие восемь спиновых функций:

$$\left. \begin{aligned} \chi\left(\frac{3}{2}, +\frac{3}{2}\right) &= \alpha_1 \alpha_2 \alpha_n, \\ \chi\left(\frac{3}{2}, +\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{\sqrt{3}} (\alpha_1 \alpha_2 \beta_n + \alpha_1 \beta_2 \alpha_n + \beta_1 \alpha_2 \alpha_n), \\ \chi\left(\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{\sqrt{3}} (\beta_1 \beta_2 \alpha_n + \beta_1 \alpha_2 \beta_n + \alpha_1 \beta_2 \beta_n), \\ \chi\left(\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right) &= \beta_1 \beta_2 \beta_n. \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Квартет, спин} \\ \text{}^{3/2}, \text{ ортоводо-} \\ \text{род, } \overline{12}_n \end{array} \quad (147.3)$$

$$\left. \begin{aligned} \chi_o\left(\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{\sqrt{6}} ((\alpha_1 \beta_2 + \beta_1 \alpha_2) \alpha_n - 2\alpha_1 \alpha_2 \beta_n), \\ \chi_o\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{\sqrt{6}} ((\alpha_1 \beta_2 + \beta_1 \alpha_2) \beta_n - 2\beta_1 \beta_2 \alpha_n). \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Дублет, спин} \\ \text{}^{1/2}, \text{ ортоводо-} \\ \text{род, } \overline{12}_n \end{array} \quad (147.4)$$

$$\left. \begin{aligned} \chi_p\left(\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1 \beta_2 - \beta_1 \alpha_2) \alpha_n, \\ \chi_p\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha_1 \beta_2 - \beta_1 \alpha_2) \beta_n. \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Дублет, спин} \\ \text{}^{1/2}, \text{ параводо-} \\ \text{род, } \overline{12}_n \end{array} \quad (147.5)$$

Все эти восемь функций суть собственные функции оператора

$$S^2 = (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_n)^2,$$

принадлежащие собственным значениям 15 и 3 соответственно для квартетных и дублетных состояний. Так как

$$S^2 = \sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \sigma_n^2 + 2(\sigma_1 \cdot \sigma_2) + 2(\sigma_n \cdot (\sigma_1 + \sigma_2)), \quad (147.6)$$

причем каждый из первых трех членов равен трем, а для четвертого имеем

$$(\sigma_1 \cdot \sigma_2) = \begin{cases} +1, & \text{ортоводород,} \\ -3, & \text{параводород,} \end{cases} \quad (147.7)$$

то окончательно получаем

$$\left. \begin{aligned} 15 &= 9 + 2 + 2(\sigma_n \cdot (\sigma_1 + \sigma_2)) \\ 3 &= 9 + 2 + 2(\sigma_n \cdot (\sigma_1 + \sigma_2)) \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{ортоводород} \\ \text{дублет} \end{array} \left\{ \begin{array}{l} \text{квартет,} \\ \text{дублет} \end{array} \right.$$

и $3 = 9 - 6 + 2(\sigma_n \cdot (\sigma_1 + \sigma_2))$, параводород, дублет. Таким образом, имеем

$$(\sigma_n \cdot (\sigma_1 + \sigma_2)) = \begin{cases} 2, & \text{ортоводород, квартет,} \\ -4, & \text{ортоводород, дублет,} \\ 0, & \text{параводород, дублет.} \end{cases} \quad (147.8)$$

Отсюда в силу формулы (147.2) мы приходим к следующим трем типам взаимодействия между нейтроном и молекулой водорода:

$$V = \frac{1}{2} (3V_t + V_s) + \begin{cases} \frac{1}{2} (V_t - V_s) \\ -(V_t - V_s) \\ 0 \end{cases} =$$

$$= \begin{cases} 2V_t, & \text{квартет, ортоводород,} \\ \frac{1}{2} V_t + \frac{3}{2} V_s, & \text{дублет, ортоводород,} \\ \frac{3}{2} V_t + \frac{1}{2} V_s, & \text{дублет, параводород.} \end{cases} \quad (147.9)$$

Возвратимся к вопросу о рассеянии нейтронов и рассмотрим предельный случай нулевой энергии. В этом пределе длина рассеяния a линейным образом связана с глубиной потенциальной ямы, если последняя „мала“. Следует, однако, подчеркнуть, что для реального *nr*-взаимодействия это довольно грубое приближение. С учетом указанного приближения мы для упругого рассеяния нейтронов получаем

$$\sigma_{\text{орто}} = 4\pi \left\{ \frac{2}{3} (2a_t)^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{1}{2} a_t + \frac{3}{2} a_s \right)^2 \right\},$$

$$\sigma_{\text{пара}} = 4\pi \left\{ \frac{3}{2} a_t + \frac{1}{2} a_s \right\}^2,$$

или,

$$\sigma_{\text{орто}} = \pi \{ (3a_t + a_s)^2 + 2(a_t - a_s)^2 \}, \quad (147.10)$$

$$\sigma_{\text{пара}} = \pi (3a_t + a_s)^2.$$

Замечание. Лучшие значения для длин рассеяния a_t и a_s в двухклонной задаче равны соответственно $+5,39$ ферми и $-23,7$ ферми. Подставляя эти значения в формулы (147.10), мы получаем $\sigma_{\text{орто}} = 55$ барн и $\sigma_{\text{пара}} = 1,77$ барн¹⁾. Характерной особенностью этого до некоторой степени грубого результата является удивительно малое значение сечения рассеяния на параводороде. Тем не менее этот результат полностью подтверждается экспериментами по рассеянию тепловых нейтронов. Если бы выполнялось равенство $a_s = -3a_t$, то сечение рассеяния на параводороде было бы в точности равно нулю. Как бы то ни было, но его малость показывает, что величина a_s должна быть большой и ее знак должен быть противоположен знаку величины a_t . С другой стороны, для существования связанного ^3S -состояния дейтрона триплетная длина рассеяния должна быть положительной. Следовательно, $a_s < 0$, и поэтому существование связанного ^1S -состояния невозможно. Необходимо отметить, что этот знак можно определить только в интерференционных опытах описанного типа, но не в экспериментах по рассеянию нейтронов на изолированных протонах, где приходится иметь дело с некогерентными волнами.

Наши результаты непосредственно относятся к предельному случаю нулевой энергии, в то время как в эксперименте нейтроны могут иметь энергию порядка нескольких сотых электронвольта. Следовательно, их длина волны не

¹⁾ 1 ферми = 10^{-13} см, 1 барн = 10^{-24} см².

так уж велика по сравнению с размером молекулы. Это вызывает появление неупругих переходов с изменением четности между вращательными состояниями ортоводорода с $J=1$ и состояниями параводорода с $J=0$. Указанные переходы появляются благодаря тому, что $r_{n1} \neq r_{n2}$. Если ввести обозначение

$$\frac{1}{4} (V_t - V_s) = U(r),$$

то для части взаимодействия, зависящей от спинов, можно написать

$$U(r_{n1})(\sigma_n \cdot \sigma_1) + U(r_{n2})(\sigma_n \cdot \sigma_2) = \frac{1}{2} (U(r_{n1}) + U(r_{n2})) (\sigma_n \cdot (\sigma_1 + \sigma_2)) + \frac{1}{2} (U(r_{n1}) - U(r_{n2})) (\sigma_n \cdot (\sigma_1 - \sigma_2)).$$

Из-за последнего члена в правой части этого равенства спиновые функции (147.3) — (147.5) больше не являются собственными функциями оператора энергии взаимодействия; именно этот член в энергии взаимодействия и вызывает орто — пара-переходы.

IV. Многочастичные задачи

А. Малое число частиц

Задача 148. Две отталкивающиеся частицы на окружности

Две одинаковые точечные частицы находятся на гладкой окружности радиуса r и взаимодействуют по закону

$$V(\varphi_1, \varphi_2) = V_0 \cos(\varphi_1 - \varphi_2), \quad (148.1)$$

это может, например, служить моделью кулоновского отталкивания электронов в основном состоянии атома гелия. Вывести закон сохранения момента количества движения и рассмотреть относительное движение частиц.

Решение. Уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial \varphi_1^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial \varphi_2^2} \right) + V_0 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) U = E \cdot U \quad (148.2)$$

допускает разделение переменных, если перейти к новым координатам

$$\alpha = \varphi_1 - \varphi_2, \quad \beta = \frac{1}{2}(\varphi_1 + \varphi_2), \quad (148.3)$$

описывающим относительное и „абсолютное“ движение частиц. Действительно, подставляя выражения

$$\frac{\partial}{\partial \varphi_1} = \frac{\partial}{\partial \alpha} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \beta}, \quad \frac{\partial}{\partial \varphi_2} = -\frac{\partial}{\partial \alpha} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \beta}$$

в уравнение (148.2), приходим к уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{mr^2} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial \alpha^2} + \frac{1}{4} \frac{\partial^2 U}{\partial \beta^2} \right) + V_0 \cos \alpha \cdot U = E \cdot U,$$

решение которого можно искать в виде

$$U(\alpha, \beta) = u(\alpha) v(\beta). \quad (148.4)$$

Теперь мы имеем

$$-\frac{\hbar^2}{mr^2} \frac{d^2 u}{d\alpha^2} + V_0 \cos \alpha \cdot u = E_\alpha \cdot u \quad (148.5)$$

и

$$-\frac{\hbar^2}{4mr^2} \frac{d^2 v}{d\beta^2} = E_\beta \cdot v, \quad (148.6)$$

причем

$$E_\alpha + E_\beta = E. \quad (148.7)$$

Абсолютное движение частиц определяется уравнением (148.6). Учитывая, что оператор проекции суммарного орбитального момента нашей двухчастичной системы на ось z дается выражением

$$L_z = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi_1} + \frac{\partial}{\partial \varphi_2} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \beta},$$

мы можем переписать уравнение (148.6) в виде

$$\frac{1}{2\Theta} L_z^2 v = E_\beta \cdot v, \quad (148.6a)$$

где $\Theta = 2mr^2$ — суммарный момент инерции обеих частиц. Последнее уравнение позволяет определить собственные значения оператора вращательной энергии. Так как решение уравнения (148.6) имеет вид

$$v = e^{iM\beta}, \quad M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (148.8)$$

то допустимые значения вращательной энергии будут равны

$$E_\beta = \frac{(\hbar M)^2}{2\Theta}. \quad (148.9)$$

Гораздо сложнее вопрос об *относительном движении* частиц, так как оно определяется дифференциальным уравнением Матье (148.5). Чтобы упростить последующие рассуждения, преобразуем уравнение (148.5) к стандартной форме, положив

$$\alpha = 2\varphi, \quad 4 \frac{mr^2}{\hbar^2} E_\alpha = \lambda, \quad 4 \frac{mr^2}{\hbar^2} V_0 = 2q. \quad (148.10)$$

Таким образом, получим

$$\frac{d^2 v}{d\varphi^2} + (\lambda - 2q \cos 2\varphi) v = 0. \quad (148.11)$$

Мы будем интересоваться периодическими решениями¹⁾ с периодом 2π по переменной α или, что то же самое, с периодом π по переменной φ . Так как в уравнении (148.11) коэффициент при функции v четным образом зависит от угла φ , то решения этого уравнения будут либо четными, либо нечетными функциями φ .

¹⁾ Здесь искомые решения принципиально отличаются от решений уравнения Шредингера с периодическим потенциалом в теории кристаллической решетки. Там решения, не будучи периодическими, при переходе от одной ячейки решетки к другой умножаются на фазовый множитель (см. задачи 28, 29). В теории кристаллической решетки энергетический спектр имеет зонную структуру, в нашем же случае спектр собственных значений λ дискретен.

Периодичность решений позволяет разложить их в ряды Фурье, поэтому мы имеем

$$\begin{aligned} u_{\text{чет}} &= A_0 + A_2 \cos 2\varphi + A_4 \cos 4\varphi + \dots; \\ u_{\text{нечет}} &= B_2 \sin 2\varphi + B_4 \sin 4\varphi + \dots \end{aligned}$$

Обычно принято обозначать собственные значения λ посредством a_0, a_2, a_4, \dots в случае четных решений и посредством b_2, b_4, b_6, \dots в случае нечетных решений¹⁾. В теории уравнения Матве показывается, что собственные значения можно расположить в следующем порядке:

$$a_0 < b_2 < a_2 < b_4 < a_4 \dots \quad (148.12)$$

На фиг. 61 приведена зависимость собственных значений от переменной q . Благодаря неравенствам (148.12) кривые на фиг. 61 не пересекаются. В случае $q=0$ имеем

$$\begin{aligned} a_0(0) &= 0, & b_2(0) &= a_2(0) = 2^2, \\ b_4(0) &= a_4(0) = 4^2 \text{ и т. д.} \end{aligned} \quad (148.13)$$

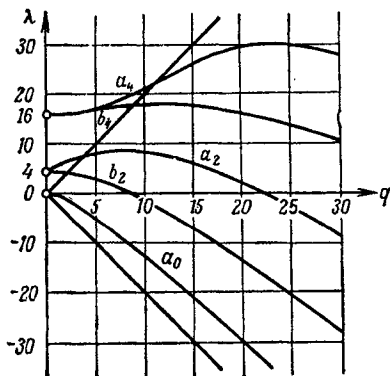
В случае же очень больших q справедливы асимптотические соотношения

$$\begin{aligned} a_{2r}(q) &\rightarrow -2q + 2(2r+1)\sqrt{q} - \frac{1}{4}[(r+1)^2 + r^2], \\ b_{2r}(q) &\rightarrow -2q + 2(2r-1)\sqrt{q} - \frac{1}{4}[(r-1)^2 + r^2]. \end{aligned} \quad (148.14)$$

Смысл соотношений (148.13) и (148.14) можно понять с помощью следующих элементарных рассуждений.

Если $q=0$, то уравнение (148.11) приобретает вид

$$\frac{d^2 v}{d\varphi^2} + \lambda v = 0$$



Фиг. 61. Зависимость собственных значений λ от глубины потенциальной ямы q .

Величины λ и q даны в безразмерных единицах в соответствии с определениями (148.10). Прямыми линиями отмечены положения минимума и максимума потенциальной энергии.

¹⁾ Насколько это возможно, мы придерживаемся обозначений, принятых в справочнике Абрамовича и Стегуна (*Abramowitz M., Stegun I. E., Handbook of Mathematical Functions, Dover Publ., New York, 1965, Ch. 20*).

Кривые, приведенные на фиг. 61, также построены согласно данным указанного справочника.

и оба его периодических решения

$$v_{\text{чет}} = A_{2r} \cos 2r\varphi, \quad v_{\text{нечет}} = B_{2r} \sin 2r\varphi$$

принадлежат одному и тому же собственному значению $\lambda = (2r)^2$. Это полностью согласуется с соотношением (148.13).

Если, с другой стороны, значение q очень велико, то вблизи точки $\alpha = \pi$ мы будем иметь очень глубокую потенциальную яму, что практически почти полностью зафиксировывает наши частицы на противоположных концах диаметра. В этом случае вместо переменной φ удобно ввести новую переменную

$$\eta = \frac{1}{2} (\varphi_1 - \varphi_2 - \pi) = \varphi - \frac{\pi}{2}. \quad (148.15)$$

Из соотношений

$$\cos 2r\varphi = (-1)^r \cos 2r\eta, \quad \sin 2r\varphi = (-1)^r \sin 2r\eta$$

следует, что функции $v_{\text{чет}}$ и $v_{\text{нечет}}$ будут соответственно четными и нечетными функциями и по отношению к переменной η . Если потенциальная яма очень глубока, то в уравнении (148.11) можно написать

$$\cos 2\varphi = -\cos 2\eta \approx -1 + 2\eta^2,$$

и оно приближенно перейдет в дифференциальное уравнение для гармонического осциллятора:

$$\frac{d^2 v}{d\eta^2} + [(\lambda + 2q) - 4q\eta^2] v = 0. \quad (148.16)$$

Как хорошо известно (см. задачу 30), собственные значения для этого уравнения равны

$$\lambda_n + 2q = 2\sqrt{q} (2n + 1), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (148.17)$$

а собственные функции, относящиеся к четным (нечетным) n , четны (нечетны) по переменной η . Соотношение (148.17) почти полностью совпадает с соотношением (148.14), если отождествить решения при малых η с решениями при больших q по схеме:

	$n=0$	1	2	3	4	5	6	...
Четные (a_{2r})	$r=0$		1		2		3	...
Нечетные (b_{2r})	$r=$	1		2		3		...

Дополнительные постоянные, фигурирующие в формулах (148.14), можно получить, удержав в разложении $\cos 2\eta$ еще один член,

а затем воспользоваться теорией возмущений. В результате получим

$$\lambda_n + 2q = 2\sqrt{q} (2n + 1) - \frac{4}{3} q \langle n | \eta^4 | n \rangle. \quad (148.18)$$

Как оказывается, этот дополнительный член обеспечивает полное согласие между формулами (148.18) и (148.14).

Замечание 1. На фиг. 61 мы изобразили диагонали двух координатных углов: нижняя диагональ отмечает положение минимума потенциальной энергии ($-2q$), верхняя — положение ее максимума ($+2q$). Собственные значения, разумеется, всегда располагаются выше линии минимума потенциальной энергии. Если они лежат ниже верхней диагонали, то соответствующие им состояния являются колебательными состояниями внутри потенциальной ямы. Так, например, при $q = 10$ имеются четыре таких колебательных состояния, пятое же собственное значение (a_4) соответствует состоянию либрационного типа. При либрации движение частиц захватывает всю окружность, так что временами положения обеих частиц совпадают. Первые четыре состояния можно было бы назвать ангармоническими колебаниями. Начиная же с пятого состояния по мере роста энергии движение все более и более приближается к движению невзаимодействующих независимых частиц.

Замечание 2. Относительное движение двух частиц происходит в потенциальном поле того же вида ($V_0 \cos \alpha$), что и в случае математического маятника. В классической механике эта задача сводится к эллиптическим интегралам, квантовая же задача требует для своего решения, как мы видели, функций Матье. Это снова показывает (см также задачу 40), насколько сложнее в математическом отношении ситуация в задачах квантовой механики по сравнению с аналогичными задачами классической механики.

Задача 149. Трехатомная линейная молекула

В положении равновесия молекула двуокиси углерода имеет форму линейной цепочки $O=C=O$. Пусть независимо от того, одинаковые или разные изотопы кислорода, равновесное состояние между атомами в комплексе $C=O$ равно a , а соответствующая упругая постоянная валентных сил равна f . Пренебрегая поперечными колебаниями, рассмотреть в гармоническом приближении одномерную модель молекулы CO_2 и определить частоты ее колебаний.

Решение. Обозначим через x_1, x_2, x_3 положения атомов на оси x , а посредством m_1, m_2, m_3 — их массы, тогда для линейной модели в гармоническом приближении уравнение Шредингера будет иметь вид

$$-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{m_i} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_i^2} + \frac{1}{2} f [(x_2 - x_1 - a)^2 + (x_3 - x_2 - a)^2] \Psi = E \Psi.$$

(149.1)

Чтобы отделить движение центра масс от относительного движения, мы перейдем к новым переменным:

$$\begin{aligned} u &= x_2 - x_1 - a, \\ v &= x_3 - x_2 - a, \\ X &= \frac{1}{M} (m_1 x_1 + m_2 x_2 + m_3 x_3), \\ M &= m_1 + m_2 + m_3. \end{aligned} \quad (149.2)$$

Старые производные связаны с новыми производными соотношениями:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_1} &= \frac{m_1}{M} \frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial u}, \\ \frac{\partial}{\partial x_2} &= \frac{m_2}{M} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial u} - \frac{\partial}{\partial v}, \\ \frac{\partial}{\partial x_3} &= \frac{m_3}{M} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial v}. \end{aligned}$$

Повторное применение этих соотношений дает

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \frac{1}{m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} &= \frac{1}{M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \\ &+ \left(\frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} \right) \frac{\partial^2}{\partial v^2} - \frac{2}{m_2} \frac{\partial^2}{\partial u \partial v}. \end{aligned}$$

Таким образом, движение центра масс действительно отделяется, и мы приходим к уравнению Шредингера, содержащему только две независимые переменные u и v ,

$$\begin{aligned} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \frac{\partial^2}{\partial u^2} + \left(\frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} \right) \frac{\partial^2}{\partial v^2} - \frac{2}{m_2} \frac{\partial^2}{\partial u \partial v} \right] + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} f(u^2 + v^2) - E \right\} \Psi = 0. \end{aligned} \quad (149.3)$$

При этом выше мы переопределили энергию E , и она теперь в отличие от (149.1) означает одну лишь энергию относительного движения. Наличие в операторе кинетической энергии смешанной производной $\partial^2/\partial u \partial v$ делает дальнейшую факторизацию невозможной. Однако если мы введем „повернутую“ систему координат

$$\begin{aligned} u' &= u \cos \alpha + v \sin \alpha, \\ v' &= -u \sin \alpha + v \cos \alpha, \end{aligned} \quad (149.4)$$

то надлежащим выбором угла α член со смешанной производной $\partial^2/\partial u' \partial v'$ можно будет обратить в нуль. Что же касается потен-

циальной энергии, то при таком преобразовании она не меняется:

$$u^2 + v^2 = u'^2 + v'^2.$$

Уравнение Шредингера в новых переменных принимает вид

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \left[\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \left(\cos^2 \alpha \frac{\partial^2}{\partial u'^2} - 2 \cos \alpha \sin \alpha \frac{\partial^2}{\partial u' \partial v'} + \sin^2 \alpha \frac{\partial^2}{\partial v'^2} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \left(\frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} \right) \left(\sin^2 \alpha \frac{\partial^2}{\partial u'^2} + 2 \cos \alpha \sin \alpha \frac{\partial^2}{\partial u' \partial v'} + \cos^2 \alpha \frac{\partial^2}{\partial v'^2} \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{2}{m_2} \left(\cos \alpha \sin \alpha \frac{\partial^2}{\partial u'^2} + (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) \frac{\partial^2}{\partial u' \partial v'} - \cos \alpha \sin \alpha \frac{\partial^2}{\partial v'^2} \right) \right] + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} f(u'^2 + v'^2) - E \right\} \Psi = 0. \quad (149.5)$$

Члены со смешанной производной исчезнут, если положить

$$\left(\frac{1}{m_3} - \frac{1}{m_1} \right) \sin 2\alpha = \frac{2}{m_2} \cos 2\alpha,$$

или

$$\operatorname{tg} 2\alpha = \frac{2m_1 m_3}{m_2 (m_1 - m_3)}. \quad (149.6)$$

Введя массовые константы A и B , определяемые соотношениями

$$\frac{1}{A} = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \cos^2 \alpha - \frac{2}{m_2} \cos \alpha \sin \alpha + \left(\frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} \right) \sin^2 \alpha, \\ \frac{1}{B} = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \sin^2 \alpha + \frac{2}{m_2} \cos \alpha \sin \alpha + \left(\frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3} \right) \cos^2 \alpha, \quad (149.7)$$

мы можем придать уравнению Шредингера значительно более простой вид:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2A} \frac{\partial^2}{\partial u'^2} + \frac{1}{2} f u'^2 \right] \Psi + \left[-\frac{\hbar^2}{2B} \frac{\partial^2}{\partial v'^2} + \frac{1}{2} f v'^2 \right] \Psi = E \Psi. \quad (149.8)$$

Теперь переменные разделяются:

$$\Psi(u', v') = \psi(u') \varphi(v'), \\ E = E_A + E_B, \quad (149.9)$$

и мы получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2A} \frac{d^2 \psi}{du'^2} + \frac{1}{2} f u'^2 \psi = E_A \psi, \\ -\frac{\hbar^2}{2B} \frac{d^2 \varphi}{dv'^2} + \frac{1}{2} f v'^2 \varphi = E_B \varphi. \quad (149.10)$$

Энергетические уровни этих двух гармонических осцилляторов мы можем написать сразу (см. задачу 30):

$$\begin{aligned} E_A &= \hbar\omega_A \left(n_A + \frac{1}{2} \right), & \omega_A &= \sqrt{f/A}; \\ E_B &= \hbar\omega_B \left(n_B + \frac{1}{2} \right), & \omega_B &= \sqrt{f/B}. \end{aligned} \quad (149.11)$$

Равенства (149.6) и (149.7), позволяющие найти константы A и B по известным массам, совместно с равенствами (149.11), определяющими энергии и частоты колебаний, полностью решают поставленную задачу.

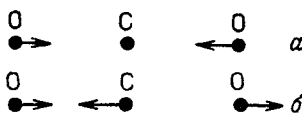
Теперь мы более подробно проанализируем нормальный случай, когда $m_1 = m_2$ (в состав молекулы входят одинаковые изотопы кислорода). В этом случае, как следует из формулы (149.6), $\alpha = \pi/4$ и для констант A и B мы, согласно (149.7), получаем

$$\frac{1}{A} = \frac{1}{m_1}, \quad \frac{1}{B} = \frac{1}{m_1} + \frac{2}{m_2}$$

и, следовательно,

$$\omega_A = \sqrt{f/m_1}, \quad \omega_B = \sqrt{1 + 2 \frac{m_1}{m_2}} \omega_A. \quad (149.12)$$

Так как частота ω_A не зависит от m_2 , то отсюда можно сделать вывод, что при колебаниях с такой частотой атом углерода остается в покое. Поскольку, кроме того, центр масс молекулы



Фиг. 62. Два нормальных колебания молекулы CO_2 . Поперечные колебания в этой задаче не рассматриваются.

предполагается неподвижным, то колебание рассматриваемого типа должно быть симметричным, что схематически изображено на фиг. 62, а. С другой стороны, колебания с частотой ω_B , в которых принимает участие и атом углерода, как можно показать, являются антисимметричными (см. фиг. 62, б). Чтобы выяснить, что соответствует этой классической картине нормальных колебаний в квантовой механике, рассмотрим свойства волновых функций (149.9). Волновая функция основного состояния (нормировка произвольная) имеет вид

$$\Psi_0(u', v') = \exp\left(-\frac{A\omega_A}{2\hbar} u'^2\right) \cdot \exp\left(-\frac{B\omega_B}{2\hbar} v'^2\right), \quad (149.13)$$

где

$$u' = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_3 - x_1 - 2a), \quad v' = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_3 - 2x_2). \quad (149.14)$$

Оба сомножителя в (149.13) имеют резкий максимум соответственно при $u' = 0$ и $v' = 0$. Таким образом, нулевые колебания совершаются вблизи положения $x_1 + x_3 = 2x_2$ (при этом атом углерода находится точно посередине между атомами кислорода) и вблизи положения $x_3 - x_1 = 2a$ (т. е. расстояние между атомами кислорода равно $2a$). Мы видим, что наиболее вероятное положение атомов в основном состоянии молекулы как раз совпадает с их классическим равновесным положением.

Рассмотрим теперь первое возбужденное состояние колебательной моды A . В этом случае к волновой функции Ψ_0 добавится лишний множитель u' . Так как функция

$$\psi(u') = u' e^{-\frac{1}{2} \lambda u'^2},$$

где

$$\lambda = \frac{A\omega_A}{\hbar},$$

имеет два экстремума противоположных знаков в точках $u' = \pm \lambda^{-1/2}$, то теперь наиболее вероятные положения атомов определяются условиями

$$x_3 - x_1 - 2a = \pm \sqrt{\frac{2}{\lambda}}, \quad x_1 + x_3 - 2x_2 = 0. \quad (149.15)$$

Классическим аналогом наиболее вероятного положения осциллирующей частицы являются точки поворота, вблизи которых частица проводит наибольшую часть времени. Таким образом, два значения u' в (149.15), отвечающие экстремумам волновой функции, соответствуют чему-то вроде амплитуд классических колебаний. Условие $v' = 0$ показывает, что атом углерода, вероятнее всего, располагается как раз посередине между атомами кислорода, расстояние же между самими атомами кислорода попеременно то увеличивается, то уменьшается, как это схематически показано на фиг. 62, a .

Если же возбуждена колебательная мода B , то положение экстремумов волновой функции определяется соотношениями

$$x_3 - x_1 - 2a = 0, \quad x_1 + x_3 - 2x_2 = \pm \sqrt{\frac{2}{\mu}}, \quad \mu = \frac{B\omega_B}{\hbar}. \quad (149.16)$$

Мы видим, что наиболее вероятное расстояние между атомами кислорода ($x_3 - x_1$) остается, как и при равновесии, равным $2a$, причем сами они сдвигаются то влево, то вправо по отношению к атому углерода, что схематически показано на фиг. 62, b .

Задача 150. Движение центра масс

В классической задаче многих тел движение центра масс отделяется от относительного движения, если в системе действуют только одни внутренние силы. Показать, что такое отделение возможно и в квантовой механике. Специально рассмотрим случай двух частиц.

Решение. Мы начнем с гамильтониана системы из N частиц, на которые не действуют внешние силы:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^N ' V_{ik}(x_i - x_k, y_i - y_k, z_i - z_k) \quad (150.1)$$

и заменим $3N$ координат x_i, y_i, z_i координатами центра масс X, Y, Z и координатами $\xi_\lambda, \eta_\lambda, \zeta_\lambda$, определяющими положение частицы λ ($\lambda = 1, 2, \dots, N-1$) относительно частицы N . Мы имеем

$$X = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^N m_i x_i, \quad M = \sum_{i=1}^N m_i, \quad (150.2)$$

$$\xi_\lambda = x_\lambda - x_N \quad (\lambda = 1, 2, \dots, N-1)$$

и соответствующие формулы для $Y, Z, \eta_\lambda, \zeta_\lambda$. Использование этих координат, разумеется, нарушает естественную симметрию гамильтониана (150.1), так как частица N искусственно выделяется из числа других частиц.

Из формул (150.2) легко получаются следующие операторные соотношения:

$$\frac{\partial}{\partial x_\nu} = \frac{m_\nu}{M} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial \xi_\nu}, \quad \nu = 1, 2, \dots, N-1,$$

$$\frac{\partial}{\partial x_N} = \frac{m_N}{M} \frac{\partial}{\partial X} - \sum_\lambda \frac{\partial}{\partial \xi_\lambda},$$

$$\sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} = \sum_{\lambda=1}^{N-1} \frac{1}{m_\lambda} \left(\frac{m_\lambda^2}{M^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + 2 \frac{m_\lambda}{M} \frac{\partial^2}{\partial X \partial \xi_\lambda} + \frac{\partial^2}{\partial \xi_\lambda^2} \right) +$$

$$+ \frac{1}{m_N} \left(\frac{m_N^2}{M^2} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - 2 \frac{m_N}{M} \sum_\lambda \frac{\partial^2}{\partial X \partial \xi_\lambda} + \sum_\mu \sum_\lambda \frac{\partial^2}{\partial \xi_\mu \partial \xi_\lambda} \right) =$$

$$= \frac{1}{M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \left\{ \sum_\lambda \frac{1}{m_\lambda} \frac{\partial^2}{\partial \xi_\lambda^2} + \frac{1}{m_N} \sum_\mu \sum_\lambda \frac{\partial^2}{\partial \xi_\mu \partial \xi_\lambda} \right\},$$

где суммирование по греческому индексу проводится от 1 до $N-1$. Мы видим, что все смешанные производные $\partial^2/\partial X \partial \xi_\lambda$ взаимно сократились и не вошли в окончательный результат.

Это позволяет разбить гамильтониан на две части:

$$H = H_0 + H_r, \quad (150.3)$$

где первая часть

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z^2} \right) \quad (150.4)$$

описывает движение центра масс, а вторая

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \sum_{\lambda} \frac{1}{m_{\lambda}} \nabla_{\lambda}^2 + \frac{1}{m_N} \sum_{\lambda} \sum_{\mu} \nabla_{\lambda} \cdot \nabla_{\mu} \right\} + V \quad (150.5)$$

— относительное движение частиц. Входящая сюда потенциальная энергия

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \sum_{\mu} V_{\lambda\mu} (\xi_{\lambda} - \xi_{\mu}, \eta_{\lambda} - \eta_{\mu}, \zeta_{\lambda} - \zeta_{\mu}) + \sum_{\lambda} V_{\lambda N} (\xi_{\lambda}, \eta_{\lambda}, \zeta_{\lambda}), \quad (150.6)$$

разумеется, также не зависит от координат центра масс. Теперь уравнение Шредингера

$$(H_0 + H_r) U = E \cdot U \quad (150.7)$$

допускает разделение переменных. Полагая

$$U = \varphi(X, Y, Z) u(\xi_{\lambda}, \eta_{\lambda}, \zeta_{\lambda}); \quad (150.8)$$

получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 \varphi = E_0 \varphi, \quad (150.9)$$

$$H_r u = E_r u, \quad (150.10)$$

$$E_0 + E_r = E. \quad (150.11)$$

Решение уравнения (150.9) имеет вид плоской волны:

$$\varphi = e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2 K^2}{2M}, \quad (150.12)$$

где \mathbf{R} — вектор с координатами X, Y, Z . Полученный результат находится в полном соответствии с классическим законом движения центра масс: центр масс движется как материальная точка с массой M и постоянным импульсом $\hbar\mathbf{K}$. Характер относительного движения частиц определяется уравнением (150.10) и совершенно не зависит от движения центра масс.

Наличие в выражении (150.5) третьего члена препятствует дальнейшей факторизации функции $u(\xi_{\lambda}, \eta_{\lambda}, \zeta_{\lambda})$. Только в двухчастичной задаче, когда $N=2$ и $\lambda=\mu=1$, часть гамильтониана, связанная с относительным движением, упрощается и принимает

вид

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{1}{m_1} \nabla_1^2 + \frac{1}{m_2} \nabla_2^2 \right\} + V_{12}(\xi_1, \eta_1, \zeta_1). \quad (150.13)$$

Вводя сюда приведенную массу m^* , определенную, как и в классической механике, соотношением

$$\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} = \frac{1}{m^*}, \quad (150.14)$$

и опуская индексы в обозначениях относительных координат и потенциальной энергии V_{12} , мы приходим к уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 u + V(\xi, \eta, \zeta) u = E_r u, \quad (150.15)$$

представляющему собой уравнение Шредингера для эквивалентной одночастичной задачи.

Замечание. В задаче 67 мы рассматривали атом водорода в рамках одночастичного подхода и считали, что ядро атома покоится. Согласно уравнению (150.15), правильнее было бы вместо массы электрона m ввести приведенную массу ядра и электрона m^* . Кроме этого, никаких других изменений, учитывающих участие ядра в относительном движении около центра масс, вносить не требуется. Так как масса ядра M значительно больше m , то вместо равенства (150.14) можно пользоваться приближенным соотношением

$$m^* = m \left(1 - \frac{m}{M} \right).$$

Сравнивая для примера частоту красной линии H_α ($n=3 \rightarrow n'=2$) в спектре атома водорода

$$\nu(H_\alpha) = \frac{5}{36} \frac{m_H^* e^4}{2\hbar^2 h}$$

с частотой соответствующей линии в спектре атома дейтерия

$$\nu(D_\alpha) = \frac{5}{36} \frac{m_D^* e^4}{2\hbar^2 h}$$

и учитывая при этом, что $M_D \approx 2M_H$, мы для разности частот получаем

$$\nu(D_\alpha) - \nu(H_\alpha) = \frac{m_D^* - m_H^*}{m_H^*} \nu(H_\alpha) \approx \frac{m}{2M_H} \nu(H_\alpha).$$

Указанное различие не очень трудно обнаружить. При длине волны 6563 Å оно составляет 4,12 см⁻¹. Тяжелый водород был открыт Юри, Брикведде и Марфи в 1931 г., наблюдавшими у линии H_α в спектре естественного водорода слабый спутник D_α [Urey, Brickwedde, Murphy, Phys. Rev., 40, 1 (1932)].

Задача 151. Теорема вириала

Доказать, что для любой квантовомеханической системы частиц, удерживаемых вместе кулоновскими силами, справедлива теорема вириала:

$$2\bar{E}_{\text{кин}} + \bar{E}_{\text{потен}} = 0.$$

Доказательство провести с помощью масштабного преобразования координат, сохраняющего нормировку волновой функции рассматриваемой системы.

Решение. Волновая функция системы N частиц с массами m_i и электрическими зарядами e_i удовлетворяет уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \nabla_i^2 \Psi + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i=1 \\ (i \neq k)}}^N \sum_{k=1}^N \frac{e_i e_k}{r_{ik}} \Psi = E \Psi \quad (151.1)$$

и условию нормировки

$$\int d\tau_1 \int d\tau_2 \dots \int \Psi^* \Psi d\tau_N = 1. \quad (151.2)$$

Средние значения кинетической и потенциальной энергий системы в состоянии Ψ определяются формулами

$$\bar{E}_{\text{кин}} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^N \frac{1}{m_i} \int d\tau_1 \int d\tau_2 \dots \int \Psi^* \nabla_i^2 \Psi d\tau_N, \quad (151.3a)$$

$$\bar{E}_{\text{потен}} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^N e_i e_k \int d\tau_1 \int d\tau_2 \dots \int \Psi^* \frac{1}{r_{ik}} \Psi d\tau_N. \quad (151.3b)$$

Масштабное преобразование

$$\mathbf{r}'_i = \lambda \mathbf{r}_i, \quad (151.4)$$

оставляющее в силе условие (151.2), означает, что волновая функция

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$$

заменяется функцией

$$\Psi_\lambda = \lambda^{3N/2} \Psi(\lambda \mathbf{r}_1, \lambda \mathbf{r}_2, \dots, \lambda \mathbf{r}_N). \quad (151.5)$$

Подставляя выражение (151.5) в формулы (151.3a) и (151.3b) и переходя к новым переменным интегрирования (151.4), а также учитывая, что

$$\nabla_i^2 = \lambda^2 \nabla_i'^2, \quad \frac{1}{r_{ik}} = \lambda \frac{1}{r'_{ik}},$$

мы вместо истинного значения энергии

$$\bar{E} = \bar{E}_{\text{кин}} + \bar{E}_{\text{потен}}$$

получаем выражение

$$\bar{E}(\lambda) = \lambda^2 \bar{E}_{\text{кин}} + \lambda \bar{E}_{\text{потен}}, \quad (151.6)$$

которое, очевидно, должно иметь минимум в том случае, когда из семейства функций (151.5) выбирается функция, являющаяся решением уравнения Шредингера, т. е. при условии $\lambda = 1$. Следовательно, при $\lambda = 1$ выражение

$$\frac{\partial \bar{E}(\lambda)}{\partial \lambda} = 2\lambda \bar{E}_{\text{кин}} + \bar{E}_{\text{потен}}$$

должно обращаться в нуль, и поэтому

$$2\bar{E}_{\text{кин}} + \bar{E}_{\text{потен}} = 0, \quad (151.7)$$

что и требовалось доказать.

Замечание. Для приближенных решений справедливость теоремы вириала не обязательна, тем более интересно, что ее можно доказать для статистической модели атома Томаса—Ферми (см. задачу 175).

Задача 152. Определитель Слэтера

Пусть волновая функция системы из N одинаковых частиц представлена в виде произведения одночастичных волновых функций и антисимметризована в соответствии с принципом Паули. Выразить среднее значение оператора, описывающего действие внешних сил, через одночастичные интегралы.

Решение. Обозначим через $u_i(\nu)$ одночастичную волновую функцию ν -й частицы в состоянии i (ν означает совокупность пространственных и спиновой координат рассматриваемой частицы). Тогда полностью антисимметричную волновую функцию системы из N одинаковых частиц можно записать в виде определителя Слэтера:

$$\psi = C \begin{vmatrix} u_1(1) & u_1(2) & \dots & u_1(N) \\ u_2(1) & u_2(2) & \dots & u_2(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_N(1) & u_N(2) & \dots & u_N(N) \end{vmatrix}, \quad (152.1)$$

раскрывая который, получаем

$$\psi = C \sum_P (-1)^P P(u_1, u_2, \dots, u_N). \quad (152.2)$$

Здесь P означает произвольную перестановку функций u_i отно-

сительно их аргументов ν , взятых в стандартном порядке $1, 2, \dots, N$. Если P —четная перестановка, то соответствующее слагаемое в сумме берется со знаком плюс, в противном случае—со знаком минус.

Внешние силы, описываемые оператором Ω , будут действовать на все частицы одинаковым образом. Это означает, что

$$\Omega = \sum_{\nu=1}^N \Omega_{\nu}, \quad (152.3)$$

и его среднее значение будет равно

$$\langle \psi | \Omega | \psi \rangle = |C|^2 \sum_{P, P'} (-1)^{P+P'} \times \\ \times \langle P' (u_1, \dots, u_N) | \sum_{\nu} \Omega_{\nu} | P (u_1, \dots, u_N) \rangle. \quad (152.4)$$

Выделим из суммы (152.4) одно слагаемое, в котором оператор Ω_{ν} действует только на функцию координат и спина ν -й частицы, например, на функцию $u_i(\nu)$. Координаты и спин любой другой, скажем μ -й частицы, фигурируют в этом слагаемом в качестве аргумента какой-нибудь другой функции u_j в обеих перестановках P и P' одновременно, так как в противном случае рассматриваемый член исчез бы в силу ортогональности одночастичных волновых функций:

$$\langle u_j | u_k \rangle = \delta_{jk}. \quad (152.5)$$

Это означает, что перестановки P и P' в отличных от нуля членах идентичны и, следовательно, знаковый множитель в (152.4) всегда равен $+1$, а вклад рассматриваемого слагаемого имеет вид одночастичного интеграла:

$$\langle P' | \Omega_{\nu} | P \rangle = \delta_{PP'} \langle u_i(\nu) | \Omega_{\nu} | u_i(\nu) \rangle. \quad (152.6)$$

Для дальнейшего подсчета суммы (152.4) заметим, что в волновую функцию ψ множитель $u_i(\nu)$ (i и ν фиксированы) входит в сочетании с определителем $N-1$ -го порядка. За вычетом функции u_i и аргумента ν у нас еще остается $N-1$ функция и $N-1$ аргумент, так что из всех $N!$ возможных перестановок в нашем распоряжении имеется $(N-1)!$ перестановок $N-1$ функции относительно $N-1$ аргумента. Таким образом, получаем

$$\langle \psi | \Omega_{\nu} | \psi \rangle = |C|^2 (N-1)! \sum_{i=1}^N \langle u_i(\nu) | \Omega_{\nu} | u_i(\nu) \rangle. \quad (152.7)$$

Этот результат, разумеется, остается в силе, какой бы оператор Ω_{ν} из суммы (152.3) мы ни брали, поэтому среднее значение $\langle \psi | \Omega | \psi \rangle$ будет содержать N одинаковых слагаемых (152.7).

Следовательно, мы имеем

$$\langle \psi | \Omega | \psi \rangle = |C|^2 N! \sum_{i=1}^N \langle u_i(\mathbf{v}) | \Omega_{\mathbf{v}} | u_i(\mathbf{v}) \rangle. \quad (152.8)$$

Нам осталось найти нормировочную постоянную C из условия

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1, \quad (152.9)$$

означающего, что в пространстве достоверно имеется N частиц. Формально это можно сделать, положив в равенстве (152.3) $\Omega_{\mathbf{v}} = 1/N$. Так как при этом $\Omega = 1$, то равенство (152.8) с учетом условия нормировки одночастичных функций (152.5) дает

$$\langle \psi | \psi \rangle = |C|^2 N! \sum_{i=1}^N \frac{1}{N} = |C|^2 N!$$

Отсюда с помощью равенства (152.9) получаем

$$C = N!^{-1/2}. \quad (152.10)$$

Теперь правую часть равенства (152.8) мы можем окончательно записать в виде простой суммы средних значений по одночастичным состояниям:

$$\langle \psi | \Omega | \psi \rangle = \sum_{i=1}^N \langle u_i(\mathbf{v}) | \Omega_{\mathbf{v}} | u_i(\mathbf{v}) \rangle. \quad (152.11)$$

Замечание. Пренебрегая симметризацией и заменив волновую функцию (152.1) простым произведением

$$\dot{\psi} = u_1(1) u_2(2) \dots u_N(N), \quad (152.12)$$

мы получили бы

$$\langle \dot{\psi} | \Omega | \dot{\psi} \rangle = \sum_{\mathbf{v}=1}^N \langle u_{\mathbf{v}} | \Omega_{\mathbf{v}} | u_{\mathbf{v}} \rangle \quad (152.13)$$

и

$$\langle \dot{\psi} | \dot{\psi} \rangle = 1, \quad (152.14)$$

т. е. по существу те же самые результаты (152.11) и (152.9), которые были найдены с помощью антисимметризованной волновой функции. Ни для взаимодействия между частицами, которое не удовлетворяет равенству (152.3), ни для неортогональных одночастичных функций, для которых нарушается условие (152.5), такое совпадение результатов не имеет места.

Задача 153. Определитель Слэтера и обменное взаимодействие

Система описывается антисимметризованной волновой функцией предыдущей задачи. Определить среднее значение оператора

$$\Omega = \frac{1}{2} \sum'_{\mu, \nu} \Omega_{\mu\nu}, \quad (153.1)$$

отвечающего парному взаимодействию частиц.

Решение. Пользуясь теми же обозначениями и нормировкой, что и в предыдущей задаче, можно записать среднее значение одного члена суммы (153.1) в виде

$$\langle \psi | \Omega_{\mu\nu} | \psi \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{P, P'} (-1)^{P+P'} \langle P' (u_1, \dots, u_N) | \Omega_{\mu\nu} | P (u_1, \dots, u_N) \rangle. \quad (153.2)$$

Все функции u_n , аргументы которых отличаются от μ и ν , должны входить в перестановки P и P' одинаковым образом, чтобы соответствующее слагаемое в сумме (153.2) не обратилось в нуль. Так как в нашем распоряжении имеются $N-2$ такие функции и столько же аргументов, то мы можем переставлять их $(N-2)!$ различными способами. Если все эти частичные перестановки одинаковым образом входят в полные перестановки P и P' , то на долю аргументов μ и ν в каждом неисчезающем члене суммы (153.2) остается только одна пара функций, например, $u_i u_j$. Таким образом, имеем

$$\langle \psi | \Omega_{\mu\nu} | \psi \rangle = \frac{(N-2)!}{N!} \sum'_{i, j} \{ \langle u_i(\mu) u_j(\nu) | \Omega_{\mu\nu} | u_i(\mu) u_j(\nu) \rangle - \langle u_j(\mu) u_i(\nu) | \Omega_{\mu\nu} | u_i(\mu) u_j(\nu) \rangle \}. \quad (153.3)$$

В первом классическом члене из фигурных скобок перестановки P и P' одинаковы даже по отношению к аргументам μ и ν , поэтому здесь эти перестановки совпадают полностью. Во втором обменном члене перестановки P и P' отличаются на одну транспозицию ($ij \rightarrow ji$), что как раз приводит к появлению знака минус.

Рассмотрим теперь сумму (153.1) таких операторов $\Omega_{\mu\nu}$. Мы имеем

$$\langle \psi | \Omega | \psi \rangle = \frac{1}{2N(N-1)} \sum_{\mu, \nu} \sum'_{i, j} \{ \langle u_i(\mu) u_j(\nu) | \Omega_{\mu\nu} | u_i(\mu) u_j(\nu) \rangle - \langle u_j(\mu) u_i(\nu) | \Omega_{\mu\nu} | u_i(\mu) u_j(\nu) \rangle \}. \quad (153.4)$$

В этой формуле индексы μ и ν являются немymi переменными, поэтому сумма $\sum'_{\mu, \nu}$ состоит из $N(N-1)$ одинаковых слагаемых (члены μ, ν и ν, μ считаются здесь различными). Следовательно, искомое среднее значение оказывается равным

$$\langle \psi | \Omega | \psi \rangle = \frac{1}{2} \sum'_{i, j} \{ \langle u_i(1) u_j(2) | \Omega_{12} | u_i(1) u_j(2) \rangle - \langle u_j(1) u_i(2) | \Omega_{12} | u_i(1) u_j(2) \rangle \}. \quad (153.5)$$

Здесь символы 1 и 2, конечно, совершенно произвольны.

Следует снова подчеркнуть, что как в этой задаче, так и в предыдущей, каждая одночастичная волновая функция u_i зависит и от пространственных координат и от спинового состояния.

Задача 154. Два атомных электрона в основном состоянии

К-оболочка атома образована двумя электронами в $1s$ -состоянии. Оценить их энергию, воспользовавшись экранированными водородными волновыми функциями в поле бесконечно тяжелого ядра с зарядом Ze .

Решение. Гамильтониан данной задачи, записанный в атомных единицах ($e = \hbar = m = 1$), выглядит следующим образом:

$$H = -\frac{1}{2}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - Z\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{1}{r_{12}}, \quad (154.1)$$

а приближенная волновая функция, согласно задаче 67, имеет вид

$$U = u(r_1)u(r_2) = \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-\alpha(r_1+r_2)}, \quad (154.2)$$

здесь

$$\alpha = Z - \sigma, \quad (154.3)$$

где σ — экранировочная постоянная. Следует ожидать, что $0 < \sigma < 1$, поскольку действие ядерного заряда на каждый электрон лишь частично экранируется другим электроном. Отдельные сомножители из выражения (154.2) удовлетворяют волновым уравнениям

$$\begin{aligned} \left(-\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{\alpha}{r_1}\right)u(r_1) &= -\frac{1}{2}\alpha^2 u(r_1), \\ \left(-\frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{\alpha}{r_2}\right)u(r_2) &= -\frac{1}{2}\alpha^2 u(r_2), \end{aligned}$$

так что

$$HU = \left[\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 - \frac{Z-\alpha}{r_1}\right) + \left(-\frac{1}{2}\alpha^2 - \frac{Z-\alpha}{r_2}\right) + \frac{1}{r_{12}}\right]U,$$

а выражение для среднего значения энергии принимает вид

$$E = \iint \left[-\alpha^2 - \frac{\sigma}{r_1} - \frac{\sigma}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}\right] U^2 d\tau_1 d\tau_2. \quad (154.4)$$

Подставляя сюда явное выражение (154.2) для функции U и учитывая нормировку каждого сомножителя u , получаем

$$E = -\alpha^2 - 2\sigma \frac{\alpha^3}{\pi} \int \frac{e^{-2\alpha r_1}}{r_1} d\tau_1 + \frac{\alpha^6}{\pi^2} \iint \frac{e^{-2\alpha(r_1+r_2)}}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2. \quad (154.5)$$

Первый интеграл в формуле (154.5) вычисляется элементарно:

$$\int \frac{e^{-2\alpha r_1}}{r_1} d\tau_1 = 4\pi \int_0^\infty r_1 e^{-2\alpha r_1} dr_1 = \frac{\pi}{\alpha^2}. \quad (154.6)$$

Чтобы вычислить двойной интеграл

$$J = \iint \frac{e^{-2\alpha(r_1+r_2)}}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2,$$

разложим дробь $1/r_{12}$ по полиномам Лежандра:

$$\frac{1}{r_{12}} = \begin{cases} \frac{1}{r_2} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^n P_n(\cos \Theta), & 0 \leq r_1 \leq r_2, \\ \frac{1}{r_1} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^n P_n(\cos \Theta), & r_2 \leq r_1 < \infty, \end{cases}$$

где Θ — угол между векторами \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 . Вклад в интеграл J дает только первый член разложения ($n=0$), поэтому имеем

$$J = \int d\tau_2 e^{-2\alpha r_2} 4\pi \left(\frac{1}{r_2} \int_0^{r_2} r_1^2 e^{-2\alpha r_1} dr_1 + \int_{r_2}^\infty r_1 e^{-2\alpha r_1} dr_1 \right).$$

Так как

$$d\tau_2 = 4\pi r_2^2 dr_2 \quad \text{и} \quad 0 \leq r_2 < \infty,$$

то все интегралы вычисляются элементарно, и мы получаем

$$J = \frac{5\pi^2}{8\alpha^5}. \quad (154.7)$$

После подстановки значений интегралов (154.6) и (154.7) среднее значение энергии (154.5) принимает вид

$$E = -\alpha^2 - 2(Z - \alpha)\alpha + \frac{5}{8}\alpha. \quad (154.8)$$

До сих пор мы не налагали на значения α никаких ограничений. Теперь же мы потребуем, чтобы значение α было оптимальным в смысле вариационного исчисления, для этого положим

$$\frac{dE}{d\alpha} = 0. \quad (154.9)$$

Отсюда получаем

$$\alpha = Z - \frac{5}{16} \quad (154.10)$$

и

$$E = -\left(Z - \frac{5}{16}\right)^2. \quad (154.11)$$

Отметим, что при таком значении α функция (154.2) становится точной собственной функцией гамильтониана

$$H^0 = -\frac{1}{2}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \alpha \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right), \quad (154.12)$$

допускающего разделение переменных. Сравнивая выражения (154.12) и (154.1), находим

$$H' = H - H^0 = -\sigma \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{1}{r_{12}}.$$

Если рассматривать теперь H' как энергию возмущения, а экранировочную постоянную σ выбрать в соответствии с равенством (154.10), то в первом порядке теории возмущений сдвиг рассматриваемого уровня

$$\Delta E = \int \int U H' U d\tau_1 d\tau_2$$

окажется равным нулю.

В заключение рассмотрим несколько числовых примеров. Развита теория описывает атомы, у которых удалены все электроны, за исключением двух электронов, находящихся на K -оболочке. Мы располагаем экспериментальными данными для

$$\begin{array}{cccccc} Z=2 & 3 & 4 & 6 & 8 \\ \text{He} & \text{Li}^+ & \text{B}^{++} & \text{C}^{4+} & \text{O}^{6+}. \end{array}$$

Во всех этих случаях измеряется не сама энергия E , а энергия ионизации I , необходимая для отрыва от иона только одного из двух K -электронов. Остающийся ион обладает всего одним электроном, поэтому его энергия равна

$$E' = -\frac{1}{2}Z^2,$$

а для энергии ионизации получаем

$$I = \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2 - \frac{1}{2}Z^2. \quad (154.13)$$

Из приводимой ниже таблицы ясно видно, что согласие экспериментальных данных с формулой (154.13) непрерывно улучшается по мере роста Z .

Z	I, эВ	
	теория	эксперимент
2	23,2	24,5
3	74,1	75,6
4	152,2	153,6
6	390	393
8	737	738

Эта закономерность вполне разумна, так как член $1/r_{12}$, ответственный за взаимодействие электронов между собой, играет все меньшую роль по мере того, как с ростом Z увеличивается связь каждого электрона с ядром.

Задача 155. Возбужденные состояния атома гелия

У нейтрального атома гелия один электрон находится в основном $1s$ -состоянии, а другой — в возбужденном состоянии с квантовыми числами n и l ($n \geq 2$, $l \geq 1$). Определить энергию ионизации, связанную с отрывом (n, l) -электрона, для орто- и парагелия. При расчете использовать водородоподобные волновые функции, считая, что $1s$ -электрон полностью экранирует одну единицу заряда ядра. В частном случае $2p$ -состояния ($n=2$, $l=1$) произвести числовые расчеты.

Решение. Если $1s$ -электрон подвержен действию полного ядерного заряда $2e$, а на (n, l) -электрон действует только экранированный заряд e , то одноэлектронные состояния описываются решениями дифференциальных уравнений

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{2}{r}\right)u = E_1 u, \quad \left(-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}\right)v_{nl} = E_n v_{nl}, \quad (155.1)$$

а именно

$$u \equiv |1\rangle = \sqrt{\frac{8}{\pi}} e^{-2r}, \quad E_1 = -2; \quad (155.2)$$

$$v_{nl} \equiv |n\rangle = R_{nl}(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi), \quad E_n = -\frac{1}{2n^2},$$

где R_{nl} — нормированные радиальные водородные функции (см. задачу 67).

Приближенное решение уравнения Шредингера для нашей двухэлектронной задачи

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}\right)\psi = E\psi \quad (155.3)$$

должно иметь вид симметризованного произведения волновых функций:

$$\psi = u(1)v_n(2) + \varepsilon v_n(1)u(2) = |1n\rangle + \varepsilon |n1\rangle, \quad (155.4)$$

где $\varepsilon = +1$ в случае парагелия (спины антипараллельны) и $\varepsilon = -1$ в случае ортогелия (спины параллельны). Условие нормировки для функции ψ имеет вид $\langle\psi|\psi\rangle = 2$.

Чтобы функция (155.4) как можно лучше удовлетворяла уравнению (155.3), мы должны надлежащим образом определить энергию E . С этой целью умножим уравнение (155.3) почленно

на совектор $\langle 1n |$:

$$\langle 1n | -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} | \psi \rangle = E \langle 1n | \psi \rangle. \quad (155.5)$$

Так как

$$\langle 1 | 1 \rangle = 1, \quad \langle n | n \rangle = 1, \quad \langle 1 | n \rangle = 0$$

(если $l \neq 0$), то некоторые из входящих в (155.5) интегралов разбиваются на более простые, а некоторые обращаются в нуль.

Так, например, мы имеем

$$\langle 1n | -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{2}{r_1} | 1n \rangle = E_1,$$

$$\langle 1n | -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{2}{r_1} | n1 \rangle = 0,$$

$$\langle 1n | -\frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{2}{r_2} | 1n \rangle = E_n - \langle n | \frac{1}{r} | n \rangle \text{ и т. д.}$$

Для всех одноэлектронных состояний теорема вириала (см. задачу 151) приводит к соотношению

$$\bar{E}_{\text{потен}} = 2E,$$

поэтому получаем

$$\langle n | \frac{1}{r} | n \rangle = -\bar{E}_{\text{потен}}^{(n)} = -2E_n = \frac{1}{n^2}.$$

Таким образом, окончательно мы приходим к следующему выражению для энергии:

$$E = -2 - \frac{3}{2n^2} + \mathcal{C} + \varepsilon \mathcal{E}, \quad (155.6)$$

где

$$\mathcal{C} = \langle 1n | \frac{1}{r_{12}} | 1n \rangle \quad (155.7)$$

означает классическую, а

$$\mathcal{E} = \langle 1n | \frac{1}{r_{12}} | n1 \rangle \quad (155.8)$$

— обменную энергии взаимодействия электронов между собой. Остается лишь вычислить эти два интеграла.

В обоих случаях мы разложим дробь $1/r_{12}$ по полиномам Лежандра:

$$\frac{1}{r_{12}} = \begin{cases} \frac{1}{r_2} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^{\lambda} P_{\lambda}(\cos \vartheta_{12}), & r_1 < r_2, \\ \frac{1}{r_1} \sum_{\lambda=0}^{\infty} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^{\lambda} P_{\lambda}(\cos \vartheta_{12}), & r_1 > r_2, \end{cases} \quad (155.9)$$

где ϑ_{12} — угол между радиус-векторами электронов r_1 и r_2 . Мы начнем с интегрирования по углам, в связи с чем нам придется вычислить интегралы

$$\mathcal{E}_{\text{угл}} = \oint d\Omega_2 |Y_{l,m}(2)|^2 \oint P_\lambda(\cos \vartheta_{12}) d\Omega_1 \quad (155.10)$$

и

$$\mathcal{E}'_{\text{угл}} = \oint d\Omega_2 Y_{l,m}^*(2) \oint Y_{l,m}(1) P_\lambda(\cos \vartheta_{12}) d\Omega_1. \quad (155.11)$$

В выражении $\mathcal{E}_{\text{угл}}$ внутренний интеграл равен $4\pi\delta_{\lambda,0}$, поэтому из всех членов разложения (155.9) у нас останется вклад лишь от члена с $\lambda=0$. Таким образом, классическая часть электрон-электронного взаимодействия будет равна

$$\begin{aligned} \mathcal{E} = 4\pi \int_0^\infty dr_2 r_2^2 |u(r_2)|^2 \left(\frac{1}{r_2} \int_0^{r_2} r_1^2 |R_{nl}(r_1)|^2 dr_1 + \right. \\ \left. + \int_{r_2}^\infty r_1 |R_{nl}(r_1)|^2 dr_1 \right). \end{aligned} \quad (155.12)$$

Чтобы вычислить внутренний интеграл в выражении (155.11), воспользуемся теоремой сложения сферических гармоник:

$$P_\lambda(\cos \vartheta_{12}) = \frac{4\pi}{2\lambda+1} \sum_{\mu=-\lambda}^{+\lambda} Y_{\lambda,\mu}^*(1) Y_{\lambda,\mu}(2). \quad (155.13)$$

Тогда мы имеем

$$\oint Y_{l,m}(1) P_\lambda(\cos \vartheta_{12}) d\Omega_1 = \frac{4\pi}{2l+1} Y_{l,m}(2) \delta_{l,\lambda}$$

и

$$\mathcal{E}'_{\text{угл}} = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{l,\lambda}. \quad (155.14)$$

Следовательно, из всех членов разложения (155.9) в обменную энергию взаимодействия дает вклад лишь член с $\lambda=l$, поэтому получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{E} = \frac{4\pi}{2l+1} \int_0^\infty dr_2 r_2^2 u(r_2) R_{nl}(r_2) \left(\frac{1}{r_2} \int_0^{r_2} r_1^2 \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^l u(r_1) R_{nl}(r_1) dr_1 + \right. \\ \left. + \int_{r_2}^\infty r_1 \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^l u(r_1) R_{nl}(r_1) dr_1 \right). \end{aligned} \quad (155.15)$$

Чем больше квантовые числа n и l , тем лучше наше приближение, так как по мере роста n и l уменьшается область перекрытия двух одноэлектронных волновых функций. Оставляя

в стороне S -состояния, мы должны ожидать от нашего метода наилучших результатов в том случае, когда $n=2$ и $l=1$. Однако если и в этом частном случае он приводит к разумным результатам, то на него тем более можно положиться в случае более высоких возбужденных состояний. Рассчитаем теперь энергию указанного возбужденного состояния атома гелия и сравним полученные результаты с экспериментальными данными.

В интересующем нас случае нормированная радиальная функция R_{nl} имеет вид

$$R_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{24}} r e^{-\frac{r}{2}}. \quad (155.16)$$

Подставляя в интегралы (155.12) и (155.15) выражения (155.16) для $R_{2,1}$ и (155.2) для u , мы после простых, хотя и несколько утомительных, вычислений находим для них следующие значения:

$$\mathcal{E} = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{13}{3125} \right) = 0,24896$$

и

$$\mathcal{E} = \frac{14}{3} \left(\frac{4}{5} \right)^3 \left(\frac{1}{5} \right)^4 = 0,00382.$$

Это дает для энергии (в атомных единицах) значение

$$E = -2,12604 + \varepsilon \cdot 0,00382.$$

Энергия ионизации равна разности энергии иона He^+ в основном состоянии $E^+ = -2$ (в этом случае один электрон находится в $1s$ -состоянии, а другой удален) и энергии E . Таким образом, мы имеем

$$I = E^+ - E = 0,12604 - \varepsilon \cdot 0,00382,$$

или

$$I = (3,429 - \varepsilon \cdot 0,104) \text{ эВ}.$$

Помещенная ниже таблица позволяет сравнить эти результаты с данными эксперимента.

	Энергия ионизации, эВ	
	теория	эксперимент
Парагелий, $\varepsilon = +1$	3,325	3,368
Ортогелий, $\varepsilon = -1$	3,533	3,623
Разность	0,208	0,255

Мы видим, что согласие вполне удовлетворительное. Даже для сдвига между пара- и ортоуровнями оно не так плохо, как можно было бы ожидать, если иметь в виду, что указанный сдвиг довольно чувствителен к перекрытию и взаимной поляризации одноэлектронных состояний. Следует отметить, что уровень парегелия с его симметричной пространственной волновой функцией лежит *выше* уровня ортогелия, обладающего антисимметричной пространственной волновой функцией. Эта ситуация, таким образом, противоположна той, с которой мы встретимся в случае молекулы H_2 (см. задачу 163). Порядок следования уровней легко понять, если учесть, что только вклад, связанный с обменной энергией взаимодействия (155.8), зависит от знака ε ; сам же обменный интеграл, обязанный своим происхождением взаимному отталкиванию пары электронов, положителен, и, следовательно, случаю $\varepsilon = 1$ отвечает более высокий уровень.

Задача 156. Возбужденные S-состояния атома гелия

Метод предыдущей задачи распространить на электронную конфигурацию $1s, ns$. Для этого по-прежнему считать, что $1s$ -электрон описывается невозмущенной водородной функцией, относительно же волновой функции ns -электрона не делать никаких специальных предположений. Рассматривая далее обменный интеграл и интеграл перекрытия как малые поправки, показать, что можно построить эффективное потенциальное поле, в котором движется ns -электрон.

Решение. Мы запишем волновую функцию в виде симметризованного произведения волновых функций одноэлектронных состояний:

$$\psi = u(1)v_n(2) + \varepsilon v_n(1)u(2) = |1n\rangle + \varepsilon |n1\rangle, \quad (156.1)$$

где $\varepsilon = \pm 1$. Для волновой функции $1s$ -электрона (в атомных единицах) имеем

$$u \equiv |1\rangle = \sqrt{\frac{8}{\pi}} e^{-2r}, \quad (156.2)$$

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{2}{r}\right)u = -2u, \quad \langle 1|1\rangle = 1.$$

Относительно же волновой функции ns -электрона мы знаем лишь, что она не зависит от углов и удовлетворяет условию нормировки:

$$v_n(r) \equiv |n\rangle, \quad \langle n|n\rangle = 1. \quad (156.3)$$

Никаких иных требований к функции $|n\rangle$ не предъявляется.

Волновая функция ψ является приближенным решением уравнения Шредингера

$$(H - E)\psi = 0, \quad (156.4)$$

в котором гамильтониан имеет вид

$$H = -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}. \quad (156.5)$$

Таковы основные уравнения нашей задачи. Прежде всего умножим уравнение (156.4) почленно на совектор $\langle 1n |$:

$$\langle 1n | H - E | 1n \rangle + \varepsilon \langle 1n | H - E | n1 \rangle = 0, \quad (156.6)$$

затем найдем интегралы, содержащие оператор H , определяемый (156.5). До сих пор наши формулы очень похожи на формулы предыдущей задачи, хотя одно существенное отличие можно усмотреть немедленно. Оно обусловлено тем, что функции $|1\rangle$ и $|n\rangle$ в данном случае неортогональны, поскольку обе они принадлежат одному и тому же значению $l=0$, но относятся к разным потенциальным полям. В этой связи мы введем интеграл перекрытия

$$S = \langle 1 | n \rangle = \langle n | 1 \rangle \quad (156.7)$$

и воспользуемся обозначениями

$$\langle 1n | \frac{1}{r_{12}} | 1n \rangle = \mathcal{C}, \quad \langle 1n | \frac{1}{r_{12}} | n1 \rangle = \mathcal{C}. \quad (156.8)$$

Теперь нам остается рассмотреть следующие интегралы:

$$\begin{aligned} \langle 1n | -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{2}{r_1} | 1n \rangle &= \langle 1 | -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{2}{r_1} | 1 \rangle = -2, \\ \langle 1n | -\frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{2}{r_2} | 1n \rangle &= \langle n | -\frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{2}{r_2} | n \rangle = K_n, \\ \langle 1n | -\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{2}{r_1} | n1 \rangle &= \langle 1n | -\frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{2}{r_2} | n1 \rangle = -2S^2. \end{aligned} \quad (156.9)$$

Здесь при получении последнего равенства мы использовали тождество

$$\langle 1 | \nabla^2 | n \rangle = \langle n | \nabla^2 | 1 \rangle.$$

С учетом этих соотношений уравнение (156.6) можно записать в виде

$$-2 + K_n + \mathcal{C} - E + \varepsilon (-4S^2 + \mathcal{C} - ES^2) = 0,$$

или

$$E = -2 + \frac{K_n + \mathcal{C} + \varepsilon (\mathcal{C} - 2S^2)}{1 + \varepsilon S^2}. \quad (156.10)$$

Так как $E^+ = -2$ есть энергия основного состояния иона He^+ , то энергия ионизации $I = E^+ - E$ теперь равна

$$I = -\frac{K_n + \mathcal{C} + \varepsilon (\mathcal{C} - 2S^2)}{1 + \varepsilon S^2}. \quad (156.11)$$

Чтобы определить величину E или величину I , мы можем вычислить интегралы S , K_n , \mathcal{E} , \mathcal{F} , пользуясь каким-нибудь достаточно удобным набором функций $|n\rangle$, зависящих от некоторого числа параметров Ритца, а затем подходящим выбором этих параметров добиться экстремальности величины E или величины I .

Если интеграл перекрытия S и обменный интеграл \mathcal{F} достаточно малы, то соотношения (156.10) и (156.11) упрощаются и принимают вид

$$E = -2 + K_n + \mathcal{E}, \quad I = -(K_n + \mathcal{E}). \quad (155.12)$$

К соотношениям точно такого же вида мы пришли бы и в том случае, если бы сразу пренебрегли симметризацией, положив $\varepsilon = 0$; именно в этом смысле можно говорить, что иногда волновые функции многочастичных задач не требуют симметризации.

Возвращаясь к определениям (156.8) и (156.9) для интегралов K_n и \mathcal{E} , можно записать первое из равенств (156.12) в виде

$$E = -2 + \langle n | \Omega | n \rangle, \quad (156.13)$$

где оператор Ω определяется формулой

$$\Omega = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{2}{r} + \int \frac{u^2(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\tau'. \quad (156.14)$$

Чтобы найти нормированную функцию $|n\rangle$, минимизирующую энергию E , мы должны рассмотреть вариацию:

$$\delta \langle n | \Omega | n \rangle + \lambda \langle \delta n | n \rangle = 0,$$

где λ — множитель Лагранжа. Так как

$$\delta \langle n | \Omega | n \rangle = 2 \langle \delta n | \Omega | n \rangle \quad \text{и} \quad \delta \langle n | n \rangle = 2 \langle \delta n | n \rangle,$$

то получаем

$$\langle \delta n | \Omega + \lambda | n \rangle = 0,$$

и ввиду произвольности вариации $|\delta n\rangle$ волновая функция $|n\rangle$ должна удовлетворять уравнению

$$(\Omega + \lambda) | n \rangle = 0.$$

Переписав теперь равенство (156.13) в виде

$$\langle n | \Omega - E - 2 | n \rangle = 0,$$

легко усмотреть, что $\lambda = -E - 2$, и, следовательно, функция $|n\rangle$ обязана удовлетворять одноэлектронному уравнению Шредингера

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 | n \rangle + V_{\text{эфф}}(r) | n \rangle = (E + 2) | n \rangle \quad (156.15)$$

с эффективным потенциалом

$$V_{\text{эфф}}(r) = -\frac{2}{r} + \int \frac{u^2(r')}{|r-r'|} d\tau'. \quad (156.16)$$

Потенциал точно такого же вида мы могли бы получить, решая уравнение Пуассона

$$\nabla^2 V_{\text{эфф}} = 4\pi\rho,$$

где ρ — плотность заряда, представляющего собой сумму отрицательного пространственного заряда $1s$ -электрона $-u^2$ и точечного ядерного заряда $+2$. Подставляя в формулу (156.16) явное выражение (156.2) для функции u , немедленно получаем

$$V_{\text{эфф}} = -\frac{1}{r} - \left(\frac{1}{r} + 2\right) e^{-4r}. \quad (156.17)$$

Найдя с помощью уравнения (156.15) функцию $|n\rangle$, мы можем затем вычислить приближенные значения *всех* интегралов, входящих в выражение для энергии (156.10). До тех пор пока величины S и \mathcal{E} удовлетворяют неравенствам $S \ll 1$, $\mathcal{E} \ll \mathcal{E}$ и, следовательно, являются лишь малыми поправками, это приближение можно считать достаточным.

Приложение. Числовые расчеты по обрисованной выше общей схеме могут оказаться довольно трудоемкими, и поэтому мы приведем для $2s$ -состояния результаты, полученные с помощью более простой вариационной процедуры. Мы будем минимизировать выражение (156.12), используя пробные функции вида

$$|2\rangle = A(e^{-2r} - pre^{-1/2r}), \quad (156.18)$$

где p — вариационный параметр Ритца и $\langle 2|2\rangle = 1$. Эти функции конечны при $r=0$ и каждая из них имеет один нуль, что необходимо для $2s$ -состояния, кроме того, они обладают правильной асимптотикой, которая определяется вторым слагаемым. Первый член в выражении (156.18) описывает отклонения поведения наших функций от поведения водородоподобной волновой функции на малых расстояниях от ядра, где экранировка ядерного заряда становится все менее существенной. Так как волновая функция $1s$ -состояния ведет себя как e^{-2r} , то этот член должен вести себя примерно таким же образом.

Пробные функции (156.18) приводят к следующим результатам:

$$\begin{aligned} \pi A^2 &= \left(\frac{1}{8} - \frac{768}{625} p + 96p^2\right)^{-1}, \\ K_2 &= 4\pi A^2 \left(-\frac{1}{16} + \frac{384}{625} p - 11p^2\right), \\ \mathcal{E} &= \pi A^2 \left(\frac{5}{32} - \frac{512 \cdot 6359}{125 \cdot 28561} p + \frac{74688}{3125} p^2\right), \end{aligned}$$

$$S = 8\sqrt{2\pi} A \left(\frac{1}{32} - \frac{96}{625} p \right),$$

$$\mathcal{E} = 128\pi A^2 \left(\frac{5}{4096} - \frac{25 \cdot 436}{3 \cdot 570 \cdot 125} p + \frac{1056}{78 \cdot 125} p^2 \right).$$

Энергия E , определяемая выражением (156.12), будет иметь минимум при подходящем выборе параметра p : он должен удовлетворять квадратному уравнению, у которого имеется один положительный корень $p = 0,1105$. Если не учитывать симметризацию, то отсюда для энергии ионизации получаем

$$I = -(K_2 + \mathcal{E}) = 0,145 \text{ ат. ед.}, \text{ или } I = 3,94 \text{ эВ.}$$

Если же при том же значении параметра p использовать для энергии ионизации полное выражение (156.11), то будем иметь

$$I = \frac{0,145 - 0,021\epsilon}{1 + 0,0225\epsilon} \text{ ат. ед.}$$

Полученные с помощью этой формулы результаты вместе с экспериментальными данными приводятся в нижеследующей таблице.

	Энергия ионизации для 2s-электрона, эВ	
	теория	эксперимент
Парагелий, $\epsilon = +1$	3,30	3,97
Ортогелий, $\epsilon = -1$	4,62	4,76
Разность	1,32	0,79

Мы видим, что теоретические значения термов, как это всегда бывает при вариационных расчетах, несколько превышают их истинные значения. Довольно значительный сдвиг между орто- и парауровнями даже в этой очень простой приближенной теории получается с 35%-ной точностью.

Задача 157. Основное состояние атома лития

Вычислить энергию основного состояния атома лития ($Z = 3$). Считать, что два 1s-электрона лития описываются водородоподобными экранированными функциями, найденными в задаче 154. Обменные эффекты не учитывать.

Решение. В данной задаче гамильтониан имеет вид

$$H = \left\{ -\frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - 3 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{1}{r_{12}} \right\} + \left\{ -\frac{1}{2} \nabla_3^2 - \frac{1}{r_3} \right\} + \left\{ \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} - \frac{2}{r_3} \right\}. \quad (157.1)$$

Здесь первая фигурная скобка соответствует двухэлектронной задаче для иона Li^+ , во второй фигурной скожке стоит гамильтониан одноэлектронной задачи, приводящий к волновой функции $2s$ -состояния третьего электрона в поле экранированного ядра с результирующим зарядом $+1$; наконец, в третьей скобке собраны остальные члены энергии взаимодействия. Такой подход к движению третьего электрона был бы вполне оправдан, если бы радиус K -оболочки был гораздо меньше радиуса орбиты $2s$ -электрона. Так как в действительности дело обстоит иначе, то использование для описания третьего электрона водородоподобной функции с $Z=1$ следует рассматривать в качестве более или менее грубого приближения.

Мы запишем волновую функцию в виде произведения

$$U(1, 2, 3) = u(1) u(2) v(3), \quad (157.2)$$

в котором $u(r)$ означает функцию $1s$ -состояния:

$$u(r) = \frac{\alpha^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha r}, \quad (157.3)$$

а эффективный заряд ядра, обусловленный взаимной экранировкой двух $1s$ -электронов иона Li^+ , определяется формулой (см. задачу 154)

$$\alpha = Z - \frac{5}{16} = 2,6875. \quad (157.4)$$

Кроме того, как следует из результатов задачи 154, энергия $(1s)^2$ -состояния

$$E^+ = \iint u(1) u(2) \left\{ -\frac{1}{2} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - 3 \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) + \frac{1}{r_{12}} \right\} u(1) u(2) d\tau_1 d\tau_2 \quad (157.5)$$

теперь определяется формулой

$$E^+ = -\alpha^2. \quad (157.6)$$

Волновую функцию третьего электрона мы возьмем из таблицы, приведенной в задаче 67 (проблема Кеплера). Для низшего $2s$ -состояния этого электрона она имеет вид

$$v(r) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \left(1 - \frac{1}{2} r \right) e^{-1/2 r} \quad (157.7)$$

и удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla_3^2 - \frac{1}{r_3} \right) v(r_3) = -\frac{1}{8} v(r_3). \quad (157.8)$$

Если функции (157.3) и (157.7) подставить в формулу для энергии

$$E = \iiint u(1)u(2)v(3)Hu(1)u(2)v(3)d\tau_1d\tau_2d\tau_3, \quad (157.9)$$

где H — гамильтониан (157.1), то в силу равенства (157.5) вклад от первой фигурной скобки выражения (157.1) будет равен E^+ , а вклад от второй фигурной скобки, согласно уравнению (157.8), будет равен $-1/8$. Таким образом, имеем

$$E = E^+ - \frac{1}{8} + \iiint u^2(1)u^2(2)v^2(3) \times \\ \times \left(\frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} - \frac{2}{r_3} \right) d\tau_1d\tau_2d\tau_3, \quad (157.10)$$

и дело сводится к вычислению последнего интеграла, который после очевидных упрощений принимает вид

$$J = 2 \int d\tau_3 v^2(3) \left\{ \int \frac{u^2(1)}{r_{13}} d\tau_1 - \frac{1}{r_3} \right\}. \quad (157.11)$$

Используя далее равенство [см. в задаче 44 формулу (44.19)]

$$\int \frac{u^2(1)}{r_{13}} d\tau_1 = \frac{1}{r_3} [1 - (1 + \alpha r_3) e^{-2\alpha r_3}],$$

получаем

$$J = -2 \int \frac{v^2(3)}{r_3} (1 + \alpha r_3) e^{-2\alpha r_3} d\tau_3.$$

Подставляя сюда вместо функции v ее выражение (157.7), мы после элементарного, но довольно громоздкого интегрирования окончательно находим

$$J = -\frac{\frac{1}{2} + 3\alpha + 16\alpha^3}{(1 + 2\alpha)^5}. \quad (157.12)$$

Отсюда для энергии основного состояния атома лития получается выражение

$$E = -\alpha^2 - \frac{1}{8} - \frac{\frac{1}{2} + 3\alpha + 16\alpha^3}{(1 + 2\alpha)^5}, \quad (157.13)$$

а энергия однократной ионизации будет равна

$$I = E^+ - E = \frac{1}{8} - \frac{\frac{1}{2} + 3\alpha + 16\alpha^3}{(1 + 2\alpha)^5}. \quad (157.14)$$

Взяв теперь для величины α значение (157.4), получаем

$$I = 0,1553 = 4,23 \text{ эВ.}$$

Найденное значение энергии ионизации следует сравнить с экспериментальным значением 5,37 эВ. Мы видим, что наша приближенная теория не слишком хороша. Причину такого различия нельзя отнести ни за счет предположения о полном экранирующем действии K -оболочки на третий электрон, ни за счет того, что мы пренебрегли небольшим различием в значениях величины α для иона и нейтрального атома. Оба указанных эффекта слишком малы, чтобы с их помощью можно было объяснить расхождение более чем в 1 эВ. У использованной нами волновой функции имеется еще две особенности, которые могли вызвать такое расхождение между теорией и экспериментом: во-первых, она имеет вид произведения, а во-вторых, она не обладает должной симметрией, и, следовательно, наша теория не учитывает обменную энергию.

Задача 158. Обменные поправки к основному состоянию атома лития

Исправить найденное в предыдущей задаче значение энергии основного состояния атома лития, приняв во внимание симметрию волновой функции.

Решение. Состояния двух $1s$ -электронов и одного $2s$ -электрона мы будем описывать соответственно теми же одноэлектронными функциями $u(r)$ и $v(r)$, которые были использованы в предыдущей задаче. Чтобы построить волновую функцию с надлежащей симметрией, мы должны принять во внимание спины электронов. Полностью антисимметричная функция записывается в виде определителя Слэтера (см. задачу 152):

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} u(1)\alpha(1) & u(2)\alpha(2) & u(3)\alpha(3) \\ u(1)\beta(1) & u(2)\beta(2) & u(3)\beta(3) \\ v(1)\alpha(1) & v(2)\alpha(2) & v(3)\alpha(3) \end{vmatrix}, \quad (158.1)$$

где спиновые функции α и β соответствуют состояниям с противоположными направлениями спинов. Определитель (158.1) представляет собой приближенное решение уравнения Шредингера

$$(H - E)|\psi\rangle = 0 \quad (158.2)$$

с гамильтонианом H , определенным в предыдущей задаче. Рассмотрим далее равенство

$$\langle\psi|H - E|\psi\rangle = 0,$$

где скалярное произведение гильбертовых векторов включает в себя наряду с интегрированием суммирование по спиновым переменным. Выполнив в этом равенстве суммирование по спи-

новым переменным, приходим к соотношению

$$\iiint \{u(1)u(2)v(3) - v(1)u(2)u(3)\} (H - E) \times \\ \times u(1)u(2)v(3) d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3 = 0. \quad (158.3)$$

Если теперь ввести обозначения

$$\tilde{E} = \iiint u(1)u(2)v(3) H u(1)u(2)v(3) d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3, \quad (158.4)$$

$$\mathcal{E} = \iiint v(1)u(2)u(3) H u(1)u(2)v(3) d\tau_1 d\tau_2 d\tau_3, \quad (158.5)$$

$$S = \int v(1)u(1) d\tau_1, \quad (158.6)$$

то исправленную формулу для энергии можно будет записать в виде

$$E = \frac{\tilde{E} - \mathcal{E}}{1 - S^2}. \quad (158.7)$$

Здесь посредством \tilde{E} обозначено нескорректированное значение энергии, определенное равенством (157.13) предыдущей задачи,

$$\tilde{E} = -\left(\alpha^2 + \frac{1}{8}\right) + J,$$

где

$$J = -\frac{\frac{1}{2} + 3\alpha + 16\alpha^3}{(1 + 2\alpha)^5}; \quad (158.8)$$

величина \mathcal{E} описывает обменную энергию, а величина S представляет собой интеграл перекрытия функций u и v , которые, как мы знаем, неортогональны. Таким образом, наша задача в основном сводится к вычислению обменной энергии (158.5). Если мы запишем гамильтониан в виде

$$H = \left(-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{\alpha}{r_1}\right) + \left(-\frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{\alpha}{r_2}\right) + \left(-\frac{1}{2} \nabla_3^2 - \frac{1}{r_3}\right) - \\ - \frac{3-\alpha}{r_1} - \frac{3-\alpha}{r_2} - \frac{2}{r_3} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}}, \quad (158.9)$$

то действие трех его первых членов на произведение $u(1)u(2)v(3)$ сведется просто к умножению соответственно на $-1/2\alpha^2$, $-1/2\alpha^2$, $-1/8$ и мы получим

$$\mathcal{E} = -\left(\alpha^2 + \frac{1}{8}\right) S^2 - (3-\alpha) S \int \frac{u(1)v(1)}{r_1} d\tau_1 - \\ - (3-\alpha) S^2 \int \frac{u^2(2)}{r_2} d\tau_2 - 2S \int \frac{u(3)v(3)}{r_3} d\tau_3 + S \iint \frac{u(1)v(1) \cdot u^2(2)}{r_{12}} d\tau_1 d\tau_2 + \\ + \iint \frac{u(1)v(1) \cdot u(3)v(3)}{r_{13}} d\tau_1 d\tau_3 + S \iint \frac{u^2(2) \cdot u(3)v(3)}{r_{23}} d\tau_2 d\tau_3.$$

Вводя сокращенные обозначения

$$U = \int \frac{u^2}{r} d\tau, \quad V = \int \frac{uv}{r} d\tau, \quad (158.10)$$

$$X = \iint \frac{u(r)v(r) \cdot u(r')v(r')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\tau d\tau', \quad (158.11)$$

$$Y = \iint \frac{u^2(r) \cdot u(r')v(r')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\tau d\tau', \quad (158.12)$$

можно записать обменную энергию в виде

$$\mathcal{E} = -\left(\alpha^2 + \frac{1}{8}\right) S^2 - (5-\alpha) SV - (3-\alpha) S^2 U + 2SY + X. \quad (158.13)$$

Отсюда для энергии (158.7) получается выражение

$$E = \tilde{E} + \frac{[J + (3-\alpha)U] S^2 + [(5-\alpha)V - 2Y] S^2 - X}{1-S^2}. \quad (158.14)$$

Теперь мы приступим к вычислению интегралов S и U, V, X, Y , определенных соответственно равенствами (158.6) и (158.10) — (158.12); для этого возьмем функции u и v в виде

$$u(r) = \frac{\alpha^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha r}, \quad v(r) = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \left(1 - \frac{1}{2}r\right) e^{-1/2r}.$$

Некоторые трудности возникают лишь при вычислении двухчастичных интегралов X и Y . Входящую в них дробь $1/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ мы можем разложить в ряд по полиномам Лежандра от $\cos(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$. Так как функции u и v не зависят от углов, то вклад будет давать только один член ряда, содержащий полином Лежандра P_0 , и, следовательно, внутренние части интегралов X и Y будут иметь вид

$$\int \frac{u(r')v(r')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\tau' = 4\pi \left\{ \frac{1}{r} \int_0^r r'^2 u(r')v(r') dr' + \int_r^\infty r' u(r')v(r') dr' \right\}.$$

Все дальнейшие вычисления тривиальны, поэтому мы приведем лишь окончательные результаты:

$$S = \frac{2\sqrt{2}\alpha^{3/2}(\alpha-1)}{\left(\alpha + \frac{1}{2}\right)^4},$$

$$U = \alpha,$$

$$V = \frac{\alpha^2 - \frac{1}{4}}{2(\alpha-1)} S,$$

$$X = \frac{\alpha^3 \left(\frac{5}{2} \alpha^2 - \frac{15}{4} \alpha + \frac{13}{8} \right)}{\left(\alpha + \frac{1}{2} \right)^7},$$

$$Y = \frac{66\alpha^6 + 26\alpha^5 - 25\alpha^4 - 16\alpha^3 - \frac{23}{8}\alpha^2 - \frac{1}{8}\alpha}{2(\alpha - 1) \left(3\alpha + \frac{1}{2} \right)^4} S.$$

Полагая здесь $\alpha = 2,6875$, получаем

$$\begin{aligned} S &= 0,203, \\ J &= -0,030, \\ U &= 2,6875, \\ V &= 0,419, \\ X &= 0,0558, \\ Y &= 0,303, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [J + (3 - \alpha) U] S^2 &= +0,0334, \\ [(5 - \alpha) V - 2Y] S &= +0,0735. \end{aligned}$$

Сумма положительных членов в числителе дроби (158.14), как мы видим, превосходит отрицательный член $-X$, поэтому обменная поправка несколько увеличивает энергию основного состояния атома лития. Этот неудачный результат объясняется выбором функции $v(r)$, которая слишком мала в зоне перекрытия; в результате мы совершенно пренебрегаем увеличением эффективного заряда, действующего на $2s$ -электрон при его проникновении внутрь $1s$ -оболочки. Пренебрежение этим эффектом вызывает лишь небольшую ошибку при вычислении нескорректированного значения энергии, определявшегося в предыдущей задаче, но может оказать большое влияние на обменную поправку. Действительно, интегралы V и Y зависят от произведения uv линейно, а интеграл X зависит от него квадратично. Таким образом, при лучшем выборе функции $v(r)$ третий (отрицательный) член в числителе дроби (158.14) мог бы стать значительно больше, в то время как второй (положительный) член возрос бы не очень существенно, так что все выражение в целом вполне могло бы изменить свой знак.

Задача 159. Электрическая восприимчивость

Пусть стационарные состояния атома описываются решениями уравнения Шредингера

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

и пусть основному состоянию соответствует вектор $|0\rangle$. Вычис-

лить электрическую поляризуемость атома α (или электрическую восприимчивость χ вещества, содержащего N атомов в 1 см^3). Какие общие соображения можно высказать о поляризуемости атомов щелочных металлов?

Решение. На атом, помещенный в электрическое поле \mathcal{E} , направленное вдоль оси z , действует возмущение

$$W = e\mathcal{E} \sum_{\lambda} z_{\lambda}. \quad (159.1)$$

Здесь $-e$ — заряд электрона, а индекс λ нумерует атомные электроны. В первом порядке теории возмущений уравнение

$$(H + W)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (159.2)$$

имеет своим решением вектор состояния

$$|\psi\rangle = |0\rangle + \sum_n' \frac{\langle n | W | 0 \rangle}{E_0 - E_n} |n\rangle,$$

или

$$|\psi\rangle = |0\rangle + e\mathcal{E} \sum_n' \frac{\langle n | \sum_{\lambda} z_{\lambda} | 0 \rangle}{E_0 - E_n} |n\rangle. \quad (159.3)$$

Среднее значение проекции дипольного момента атома на направление поля определяется формулой

$$p_z = -e \langle \psi | \sum_{\lambda} z_{\lambda} | \psi \rangle. \quad (159.4)$$

С точностью до членов первого порядка малости включительно имеем

$$p_z = -e \left\{ \langle 0 | \sum_{\lambda} z_{\lambda} | 0 \rangle + \sum_n' \left[\frac{\langle n | W | 0 \rangle}{E_0 - E_n} \langle 0 | \sum_{\lambda} z_{\lambda} | n \rangle + \frac{\langle 0 | W | n \rangle}{E_0 - E_n} \langle n | \sum_{\lambda} z_{\lambda} | 0 \rangle \right] \right\}.$$

Первый член в этом выражении характеризует дипольный момент (если таковой имеется) невозмущенного атома. Второй член описывает дипольный момент, индуцированный полем. Обозначая последний посредством $p_{\text{инд}}$, определим поляризуемость атома α равенством

$$p_{\text{инд}} = \alpha \mathcal{E}. \quad (159.5)$$

Таким образом, находим

$$\alpha = 2e^2 \sum_n' \frac{|\langle n | \sum_{\lambda} z_{\lambda} | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0}. \quad (159.6)$$

Здесь E_0 означает энергию основного состояния, поэтому знаменатель выражения (159.6) положителен и, следовательно, поляризуемость α также положительна.

Электрическая восприимчивость χ представляет собой коэффициент пропорциональности между напряженностью поля и поляризацией вещества $P = Np_{\text{инд}}$:

$$P = \chi \mathcal{E}, \quad (159.7)$$

так что

$$\chi = 2Ne^2 \sum_n' \frac{|\langle n | \sum z_k | 0 \rangle|^2}{E_n - E_0}, \quad (159.8)$$

и, следовательно, $\chi > 0$.

Атомы щелочных металлов состоят из атомного остова и одного внешнего электрона. Возбуждение электронов атомного остова требует значительной энергии, что приводит к появлению больших знаменателей в формуле (159.8). По этой причине при грубых оценках достаточно учесть возбужденные состояния одного внешнего электрона, движущегося в поле невозмущенного атомного остова. Соответствующие волновые функции можно записать

$$|0\rangle = u(r), \quad |n\rangle = v_n(r) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi),$$

причем выше мы учли, что основное состояние $|0\rangle$ является s -состоянием и не зависит от углов. Так как

$$z = r \cos \vartheta = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1,0},$$

то для матричного элемента $\langle n | z | 0 \rangle$ имеет место формула

$$\langle n | z | 0 \rangle = \int_0^\infty dr r^3 v_n(r) u(r) \oint Y_{l,m}^* \cos \vartheta d\Omega,$$

и он не обращается в нуль только при $l=1$ и $m=0$. В этом последнем случае получаем

$$\langle n | z | 0 \rangle = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \int_0^\infty r^3 v_n(r) u(r) dr.$$

При дальнейших вычислениях необходимо детально знать радиальную часть волновой функции.

Если бы мы не пользовались безразмерными единицами, то нетрудно было бы увидеть, что поляризуемость α имеет размерность объема, поэтому по порядку величины она, грубо говоря, должна равняться $(\hbar^2/me^2)^3$.

Замечание. С таким же успехом можно было бы рассмотреть эффект Штарка второго порядка, приводящий к сдвигу уровня

$$\Delta_2 E = \sum_n' \frac{|\langle 0 | W | n \rangle|^2}{E_0 - E_n}.$$

Этот сдвиг должен равняться $-\frac{1}{2}\alpha\mathcal{E}^2$, отсюда для α получается то же самое выражение, которое было найдено выше.

Задача 160. Диамагнитная восприимчивость неона

Вычислить диамагнитную восприимчивость неона ($Z = 10$), воспользовавшись водородоподобными функциями с различными экранировочными постоянными $\sigma_{n,l}$. При числовых расчетах можно положить

$$\sigma_{1,0} = 0,23, \quad \sigma_{2,0} = 3,26, \quad \sigma_{2,1} = 4,14.$$

Решение. Диамагнитная восприимчивость на 1 моль вещества определяется формулой [см. равенство (128.14)]

$$\chi = -\frac{e^2}{6mc^2} N \sum \langle r^2 \rangle. \quad (160.1)$$

Здесь N — число Авогадро ($N = 6,02 \cdot 10^{23}$), а суммирование распространяется на все электроны данного атома (или молекулы). Средние значения r^2 в состояниях с волновыми функциями

$$u_{n,l,m} = \frac{1}{r} \chi_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

определяются интегралами

$$\langle r^2 \rangle = \int_0^\infty r^2 |\chi_{n,l}|^2 dr. \quad (160.2)$$

Радиальные части водородоподобных функций можно взять из таблицы, приведенной в задаче 67, заменив в них величину Z величиной $Z - \sigma$. Как нетрудно проверить, для интегралов (160.2) получаются следующие значения [в единицах $(\hbar^2/me^2)^2$]¹⁾:

$$\begin{array}{ccc} (n, l) = (1, 0), & (2, 0), & (2, 1), \\ (Z - \sigma)^2 \langle r^2 \rangle = 3, & 42, & 30. \end{array}$$

¹⁾ Эти результаты получаются как частные случаи общего соотношения

$$\langle r^2 \rangle = \frac{n^2}{2Z^2} \{5n^2 + 1 - 3l(l+1)\},$$

вывод которого весьма громоздок и не представляет особого интереса. По поводу деталей см., например, *Bethe H. A., Salpeter E. E.* в книге: *Encyclopedia of Physics*, vol. 35, Springer, Berlin—Göttingen—Heidelberg, 1957, p. 103. (Имеется перевод: *Бете Г., Солпитер Э.*, Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами, Физматгиз, 1960, стр. 33.— *Прим. перев.*)

Число электронов, находящихся в этих трех (n, l)-состояниях, соответственно равно 2, 2, 6. Порядок величины диамагнитной восприимчивости будет определяться множителем

$$\chi_0 = \frac{e^2}{6mc^2} N \left(\frac{\hbar^2}{me^2} \right)^2 = 0,790 \cdot 10^{-6} \text{ см}^3/\text{моль}. \quad (160.3)$$

Таким образом, для диамагнитной восприимчивости неона получаем

$$\begin{aligned} \chi_{\text{Ne}} &= -\chi_0 \left\{ \frac{2 \cdot 3}{(10 - \sigma_{1,0})^2} + \frac{2 \cdot 42}{(10 - \sigma_{2,0})^2} + \frac{6 \cdot 30}{(10 - \sigma_{2,1})^2} \right\} = \\ &= -5,61 \cdot 10^{-6} \text{ см}^3/\text{моль}. \end{aligned} \quad (160.4)$$

Этот результат надо сравнить с экспериментальным значением

$$\chi_{\text{Ne}} = -6,7 \cdot 10^{-6} \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Отметим, что вклад отдельных подоболочек в диамагнитную восприимчивость неона [т. е. вклад от трех членов из (160.4)] соответственно составляет

$$\chi(1s) = -0,05, \quad \chi(2s) = -1,46, \quad \chi(2p) = -4,10 \cdot 10^{-6} \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Как мы видим, самая внешняя подоболочка вносит наибольший вклад. К сожалению, для электронов этой подоболочки эффект экранировки, будучи очень большим по величине, недостаточно хорошо известен экспериментально.

Задача 161. Силы Ван-дер-Ваальса

Два атома водорода, находящиеся в *основном состоянии*, расположены на расстоянии R друг от друга. Считая ядра атомов покоящимися, показать, что в первом порядке теории возмущений энергия взаимодействия атомов равна нулю и что учет второго порядка теории возмущений приводит к силам притяжения Ван-дер-Ваальса. В той части гамильтониана, которая ответственна за взаимодействие, оставить только главные члены, пропорциональные наиминимум отрицательной степени R .

Решение. Пусть положение электрона 1 относительно ядра a характеризуется радиус-вектором \mathbf{r}_1 с компонентами x_1, y_1, z_1 , а положение электрона 2 относительно ядра b — радиус-вектором \mathbf{r}_2 с компонентами x_2, y_2, z_2 , и пусть ось z направлена по прямой, соединяющей ядра атомов (фиг. 63). При покоящихся ядрах (приближение Борна—Оппенгеймера) гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид

$$H = H^0 + H', \quad (161.1)$$

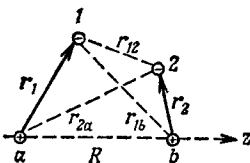
где оператор

$$H^0 = -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} \quad (161.2)$$

описывает два независимых атома, а оператор

$$H' = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{1b}} - \frac{e^2}{r_{2a}} \quad (161.3)$$

описывает их взаимодействие. Мы будем рассматривать оператор H' в качестве энергии возмущения. Если оператор H' раз-



Ф и г. 63. Относительное расположение электронов и ядер.

Взаимодействия, показанные пунктирными линиями, включены в энергию возмущения.

ложить в ряд по отрицательным степеням R , предполагая, что $r_1 \ll R$ и $r_2 \ll R$, то основной член разложения будет соответствовать взаимодействию двух диполей $a1$ и $b2$ с моментами $\mathbf{p}_1 = -e\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{p}_2 = -e\mathbf{r}_2$. Оставляя один этот член, получаем

$$H' = \frac{\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2}{R^3} - 3 \frac{(\mathbf{p}_1 \mathbf{R})(\mathbf{p}_2 \mathbf{R})}{R^5}. \quad (161.4)$$

В координатной записи эта формула принимает вид

$$H' = \frac{e^2}{R^3} (x_1 x_2 + y_1 y_2 - 2z_1 z_2). \quad (161.5)$$

Она будет использоваться в последующих вычислениях.

Пусть теперь $u_0(r)$ означает волновую функцию атома в основном состоянии, тогда волновую функцию всей системы в нулевом приближении теории возмущений можно записать в виде произведения

$$U(1, 2) = u_0(r_1) u_0(r_2) \quad (161.6)$$

Мы пренебрегаем симметризацией, так как обменные эффекты экспоненциально убывают с ростом расстояния R .

В нулевом приближении энергия системы равна сумме энергий двух невзаимодействующих атомов. В первом порядке теории возмущений мы должны к ней добавить величину

$$E' = \langle U | H' | U \rangle = 0.$$

Нетрудно проверить, что эта поправка действительно равна нулю.

Так, например, взяв первый член выражения (161.5), имеем

$$\frac{e^2}{R^3} \langle U | x_1 x_2 | U \rangle = \frac{e^2}{R^3} \langle u_0 | x | u_0 \rangle^2 = \frac{e^2}{R^3} \left[\int u_0^2(r) x d\tau \right]^2.$$

Фигурирующий здесь интеграл описывает среднее значение компоненты дипольного момента невозмущенного атома, которое для сферически симметричного состояния равно нулю¹⁾.

Во втором порядке теории возмущений поправка к энергии имеет вид

$$E'' = \sum_n' \frac{|\langle 0 | H' | n \rangle|^2}{E_0 - E_n}, \quad (161.7)$$

где суммирование ведется по всем возбужденным состояниям, а индекс 0 относится к основному состоянию. Так как $E_n > E_0$, то все знаменатели в этой сумме отрицательные величины, поэтому $E'' < 0$, и между атомами возникает притяжение. Матричные элементы зависят от величины R^{-3} , т. е. только от постоянного множителя, как это видно из формулы (161.5). Таким образом, энергия E'' имеет вид

$$E'' = -\frac{C}{R^6},$$

где C — положительная постоянная. Но, как хорошо известно, именно такой зависимостью энергии от расстояния характеризуются силы притяжения Ван-дер-Ваальса.

Литература

Schiff L. I., Quantum Mechanics, New York, 1949, p. 174—178. (Имеется перевод: *Шифф Л.*, Квантовая механика, ИЛ, 1959, стр. 205—208.)

Задача 162. Обменное вырождение при наличии возбуждения

Два атома водорода покоятся на расстоянии R друг от друга и находятся в *различных* квантовых состояниях: один — в основном s -состоянии, а другой — в возбужденном p -состоянии. Как было показано в предыдущей задаче, между атомами имеет место

¹⁾ Если оба атома находятся в одном и том же состоянии, то такие интегралы всегда обращаются в нуль, и S -состояние не является в этом смысле исключением (см. также следующую задачу). Даже в случае двух возбужденных состояний функция $|u_0|^2$ зависит от углов как квадрат сферической гармоники, который можно разложить на сумму сферических гармоник одних *четных* порядков. Но в подынтегральном выражении имеются еще координаты x , y или z , пропорциональные сферическим гармоникам первого порядка, т. е. нечетного порядка, поэтому рассматриваемые интегралы будут равны нулю в силу ортогональности сферических гармоник четных и нечетных порядков.

диполь-дипольное взаимодействие. Убедиться, что теперь даже на больших расстояниях, где по-прежнему можно не учитывать перекрытие волновых функций, первый порядок теории возмущений дает ненулевой вклад в энергию системы, и вычислить соответствующую поправку к невозмущенной энергии.

Решение. Пусть $|l, m\rangle$ означает волновую функцию отдельного атома в состоянии с квантовыми числами l и m , тогда основное состояние будет описываться волновой функцией $|00\rangle$, а три возможных p -состояния — волновыми функциями $|1m\rangle$, где $m = 1, 0, -1$. Волновые функции всей системы в нулевом приближении будут иметь вид произведений, и мы их обозначим через

$$|00, 1m\rangle \quad \text{и} \quad |1m, 00\rangle, \quad (162.1)$$

причем первая пара квантовых чисел здесь относится к первому атому, а вторая пара — ко второму.

Оператор (161.5) мы по-прежнему будем рассматривать в качестве энергии возмущения. Вводя обозначения

$$\xi = x + iy, \quad \xi^\dagger = x - iy, \quad (162.2)$$

его можно записать в виде

$$H' = \frac{e^2}{2R^3} (\xi_1 \xi_2^\dagger + \xi_1^\dagger \xi_2 - 4z_1 z_2). \quad (162.3)$$

Оператор (162.3) линейно зависит от координат каждого электрона, и, следовательно, его матричные элементы, вычисленные с помощью функций типа (162.1), будут отличны от нуля только в тех случаях, когда в них комбинируются s - и p -состояния для обоих электронов одновременно¹⁾. Эти матричные элементы имеют вид

$$\langle 1m_1, 00 | H' | 00, 1m_2 \rangle \quad \text{и} \quad \langle 00, 1m_2 | H' | 1m_1, 00 \rangle.$$

В силу билинейной структуры оператора H' , определяемого (162.3), их можно представить в виде суммы произведений матричных элементов отдельных атомов:

$$\begin{aligned} \langle 1m_1, 00 | H' | 00, 1m_2 \rangle &= \frac{e^2}{2R^3} (\langle 1m_1 | \xi | 00 \rangle \langle 00 | \xi^\dagger | 1m_2 \rangle + \\ &+ \langle 1m_1 | \xi^\dagger | 00 \rangle \langle 00 | \xi | 1m_2 \rangle - 4 \langle 1m_1 | z | 00 \rangle \langle 00 | z | 1m_2 \rangle). \end{aligned} \quad (162.4)$$

¹⁾ Можно было бы рассмотреть любые состояния с четным и нечетным $l' = l \pm 1$, например p - и d -состояния. Это, однако, приводит к изменению волновых функций (162.1).

Обозначая через $f_l(r)$ радиальную часть волновой функции отдельного атома и полагая для простоты

$$r_0 = \int_0^{\infty} r^3 f_0(r) f_1(r) dr, \quad (162.5)$$

получаем следующий результат для матричных элементов, фигурирующих в правой части формулы (162.4):

$$\begin{aligned} \langle 11 | \xi | 00 \rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} r_0, & \langle 00 | \xi | 1-1 \rangle &= -\sqrt{\frac{2}{3}} r_0, \\ \langle 1-1 | \xi^\dagger | 00 \rangle &= -\sqrt{\frac{2}{3}} r_0, & \langle 00 | \xi^\dagger | 11 \rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} r_0, \\ \langle 10 | z | 00 \rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}} r_0, & \langle 00 | z | 10 \rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}} r_0. \end{aligned} \quad (162.6)$$

При всех других комбинациях квантовых чисел эти матричные элементы обращаются в нуль. Таким образом, имеем

$$\begin{aligned} &\langle 1m_1, 00 | H' | 00, 1m_2 \rangle = \\ &= \frac{e^2 r_0^2}{2R^3} \left(\frac{2}{3} \delta_{1, m_1} \delta_{1, m_2} + \frac{2}{3} \delta_{-1, m_1} \delta_{-1, m_2} - \frac{4}{3} \delta_{0, m_1} \delta_{0, m_2} \right). \end{aligned} \quad (162.7)$$

Мы видим, что матричный элемент (162.7) отличен от нуля только при условии $m_1 = m_2$.

Все шесть волновых функций нулевого приближения (162.1) принадлежат одному и тому же собственному значению, и чтобы найти поправку к энергии в первом порядке теории возмущений, мы должны решить секулярное уравнение. Если E' — искомая поправка, а функции нулевого приближения расположены в ниже-следующем порядке:

$|00, 11\rangle, |11, 00\rangle, |00, 10\rangle, |10, 00\rangle, |00, 1-1\rangle, |1-1, 00\rangle,$

то наше секулярное уравнение будет иметь вид

$$\begin{vmatrix} -E' & \frac{2}{3}\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{2}{3}\varepsilon & -E' & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E' & -\frac{4}{3}\varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{4}{3}\varepsilon & -E' & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -E' & \frac{2}{3}\varepsilon \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{2}{3}\varepsilon & -E' \end{vmatrix} = 0, \quad (162.8)$$

где

$$\varepsilon = \frac{e^2 r_0^2}{2R^3}. \quad (162.9)$$

Этот определитель можно разложить на три определителя второго порядка, что существенно упрощает его вычисление. Результаты расчетов приведены в ниже-следующей таблице.

Состояние	Λ	Волновая функция (без нормировки)	E'
Π_g	1	$ 00, 11\rangle + 11, 00\rangle$	$+2/3\varepsilon$
Π_u	1	$ 00, 11\rangle - 11, 00\rangle$	$-2/3\varepsilon$
Σ_g	0	$ 00, 10\rangle + 10, 00\rangle$	$-4/3\varepsilon$
Σ_u	0	$ 00, 10\rangle - 10, 00\rangle$	$+4/3\varepsilon$
Π_g	-1	$ 00, 1-1\rangle + 1-1, 00\rangle$	$+2/3\varepsilon$
Π_u	-1	$ 00, 1-1\rangle - 1-1, 00\rangle$	$-2/3\varepsilon$

Здесь Λ означает сумму квантовых чисел m для обоих атомов и, следовательно, характеризует проекцию полного орбитального момента электронов на ось молекулы, а для классификации состояний использованы обозначения, принятые в молекулярной спектроскопии. Символы Σ и Π относятся соответственно к состояниям с $\Lambda = 0$ и ± 1 , а индексы g и u — к четным и нечетным волновым функциям. Два Π_g -состояния обладают одинаковой энергией, и поэтому все еще вырождены. Это же замечание относится и к двум Π_u -состояниям. Последний столбец в таблице дает энергию взаимодействия E' в единицах ε .

Если пользоваться атомными единицами, то водородоподобные волновые функции f_0 и f_1 (см. задачу 67) будут иметь вид

$$f_0 = 2e^{-r}, \quad f_1 = \frac{\sqrt{6}}{12} re^{-1/2 r},$$

и интеграл (162.5) нетрудно вычислить:

$$r_0 = \sqrt{6} \cdot \frac{128}{243} \quad (162.10)$$

Тогда для ε на основании формулы (162.9) получим

$$\varepsilon = \frac{16384}{19683} \frac{e^2 a_0^2}{R^3}, \quad (162.11)$$

где a_0 — радиус боровской орбиты. Мы видим, что во всех состояниях энергия взаимодействия E' пропорциональна R^{-3} . Таким образом, на больших расстояниях она убывает медленнее энергии взаимодействия, которая соответствует силам Ван-дер-Ваальса и пропорциональна R^{-6} . Знак рассматриваемого взаимодействия зависит от состояния системы: в состояниях Σ_u и Π_g атомы отталкиваются, а в состояниях Σ_g и Π_u притягиваются.

Литература

Herzberg G., Spectra of diatomic molecules, 1946. (Имеется перевод: Герцберг Г., Спектры и строение двухатомных молекул, ИЛ, 1949.)

Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М., Квантовая механика, Физматгиз, 1963, стр. 329.

Margenau H., Rev. Mod. Phys., 11, 1 (1939).

King G. W., Van Vleck J. H., Phys. Rev., 55, 1165 (1939).

Задача 163. Нейтральная молекула водорода

Найти энергию основного состояния и равновесный размер нейтральной молекулы водорода. Для решения воспользоваться методом, аналогичным методу, примененному в задаче 44 к иону H_2^+ .

Решение. В приближении Борна—Оппенгеймера, когда положения ядер зафиксированы, рассматриваемая задача представляет собой проблему двух тел. Снабдив ядра (протоны) индексами a и b , а электроны—индексами 1 и 2, мы можем записать гамильтониан (в атомных единицах) в виде

$$H = -\frac{1}{2}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{r_{12}} - \left(\frac{1}{r_{a1}} + \frac{1}{r_{b1}} + \frac{1}{r_{a2}} + \frac{1}{r_{b2}} \right) + \frac{1}{R}, \quad (163.1)$$

где R —расстояние между ядрами. В предельном случае очень больших расстояний R волновая функция системы должна принимать вид произведения волновых функций отдельных атомов. Если электрон 1 находится вблизи ядра a , а электрон 2—вблизи ядра b , то мы имеем произведение $f(\mathbf{r}_{a1})f(\mathbf{r}_{b2})$, если же поменять электроны местами, то имеем произведение $f(\mathbf{r}_{b1})f(\mathbf{r}_{a2})$. При конечных расстояниях R разумным приближением будет линейная комбинация двух таких произведений. Из соображений симметрии следует, что волновую функцию основного состояния мы должны выбрать в виде симметричной комбинации:

$$U(1,2) = \alpha [f(\mathbf{r}_{a1})f(\mathbf{r}_{b2}) + f(\mathbf{r}_{b1})f(\mathbf{r}_{a2})]. \quad (163.2)$$

Заметим, что при этом спины электронов в соответствии с принципом Паули будут антипараллельны. Антисимметричную комбинацию, которая также является решением, но не приводит к притяжению между атомами и к образованию молекулы, мы рассматривать не будем.

После подстановки функции (163.2) в уравнение Шредингера

$$HU = E \cdot U \quad (163.3)$$

с гамильтонианом (163.1) получаем

$$\begin{aligned} F(\mathbf{r}_{a1})f(\mathbf{r}_{b2}) + f(\mathbf{r}_{a1})F(\mathbf{r}_{b2}) + \left[\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{a2}} - E + \frac{1}{R} \right] f(\mathbf{r}_{a1})f(\mathbf{r}_{b2}) + \\ + F(\mathbf{r}_{b1})f(\mathbf{r}_{a2}) + f(\mathbf{r}_{b1})F(\mathbf{r}_{a2}) + \left[\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{a1}} - \frac{1}{r_{b2}} - E + \frac{1}{R} \right] \times \\ \times f(\mathbf{r}_{b1})f(\mathbf{r}_{a2}) = 0, \quad (163.4) \end{aligned}$$

где для простоты введено обозначение:

$$F(\mathbf{r}_{a1}) = \left(-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{r_{a1}} \right) f(\mathbf{r}_{a1}). \quad (163.5)$$

Поддействуем теперь на левую часть уравнения (163.4) оператором

$$\int d\tau_1 \int d\tau_2 f^*(\mathbf{r}_{a1}) f^*(\mathbf{r}_{b2}) \dots$$

(функция f предполагается нормированной) и введем обозначения: для интеграла перекрытия

$$S = \int f^*(\mathbf{r}_{a1}) f(\mathbf{r}_{b1}) d\tau_1; \quad (163.6)$$

для кулоновских интегралов

$$\mathcal{E} = \int \frac{1}{r_{b1}} |f(\mathbf{r}_{a1})|^2 d\tau_1 \quad (163.7)$$

и

$$\mathcal{E}' = \iint \frac{1}{r_{12}} |f(\mathbf{r}_{a1})|^2 |f(\mathbf{r}_{b2})|^2 d\tau_1 d\tau_2; \quad (163.8)$$

для обменных интегралов

$$\mathcal{E} = \int \frac{1}{r_{a1}} f^*(\mathbf{r}_{a1}) f(\mathbf{r}_{b1}) d\tau_1 \quad (163.9)$$

и

$$\mathcal{E}' = \iint \frac{1}{r_{12}} f^*(\mathbf{r}_{a1}) f(\mathbf{r}_{b1}) f(\mathbf{r}_{a2}) f^*(\mathbf{r}_{b2}) d\tau_1 d\tau_2; \quad (163.10)$$

для двух оставшихся интегралов

$$A = \int f^*(\mathbf{r}_{a1}) F(\mathbf{r}_{a1}) d\tau_1, \quad (163.11)$$

$$A' = \int f^*(\mathbf{r}_{a1}) F(\mathbf{r}_{b1}) d\tau_1. \quad (163.12)$$

С учетом указанных обозначений получаем

$$2(A + A'S) - 2(\mathcal{E} + \mathcal{E}'S) + (\mathcal{E}' + \mathcal{E}') = \left(E - \frac{1}{R} \right) (1 + S^2), \quad (163.13)$$

или

$$E = 2 \frac{A + A'S}{1 + S^2} - \frac{2(\mathcal{E} + \mathcal{E}'S) - (\mathcal{E}' + \mathcal{E}')}{1 + S^2} + \frac{1}{R}. \quad (163.14)$$

Применяя тот же метод, который был использован в задаче 44 при рассмотрении иона H_2^+ , мы теперь положим

$$f(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\gamma^3}{\pi}} e^{-\gamma r}. \quad (163.15)$$

Случаю $\gamma = 1$ соответствует волновая функция основного состояния атома водорода. Мы будем считать величину γ вариационным параметром Ритца и попытаемся получить несколько лучшее приближение. Используя явный вид функции (163.15), мы в соответствии с равенством (163.5) находим

$$F(\mathbf{r}_{a1}) = \left(-\frac{1}{2}\gamma^2 + \frac{\gamma-1}{r_{a1}} \right) f(\mathbf{r}_{a1}),$$

так что теперь интегралы (163.11) и (163.12) будут равны

$$A = -\frac{1}{2}\gamma^2 + \gamma(\gamma-1), \quad A' = -\frac{1}{2}\gamma^2 S + (\gamma-1)\mathcal{E}. \quad (163.16)$$

Далее можно показать, что интеграл перекрытия S зависит только от комбинации переменных

$$\rho = \gamma R, \quad (163.17)$$

которую мы можем использовать наряду с величиной γ в качестве второго параметра Ритца. Все остальные интегралы \mathcal{E} , \mathcal{E}' , \mathcal{E} , \mathcal{E}' пропорциональны γ , поэтому мы можем написать

$$\mathcal{E} = \gamma \bar{\mathcal{E}}(\rho), \quad \mathcal{E}' = \gamma \bar{\mathcal{E}}'(\rho), \quad \mathcal{E} = \gamma \bar{\mathcal{E}}(\rho), \quad \mathcal{E}' = \gamma \bar{\mathcal{E}}'(\rho). \quad (163.18)$$

В этих обозначениях энергия (163.14) принимает вид

$$E = -a\gamma + b\gamma^2, \quad (163.19)$$

где величины

$$a(\rho) = \frac{2(1 + \bar{\mathcal{E}}) + 4S\bar{\mathcal{E}} - (\bar{\mathcal{E}}' + \bar{\mathcal{E}}')}{1 + S^2} - \frac{1}{\rho} \quad (163.20)$$

и

$$b(\rho) = \frac{1 - S^2 + 2S\bar{\mathcal{E}}}{1 + S^2} \quad (163.21)$$

зависят только от параметра ρ . Энергия будет минимальна, если выполняется условие

$$\frac{\partial E}{\partial \gamma} = -a + 2b\gamma = 0,$$

или

$$\gamma = \frac{a}{2b}. \quad (163.22)$$

Тогда искомое минимальное значение энергии будет равно

$$E = -\frac{a^2}{4b}. \quad (163.23)$$

Нам осталось вычислить пять интегралов (163.6)—(163.10). Три из них были найдены в задаче 44 для H_2^+ :

$$\begin{aligned} S &= \left(1 + \rho + \frac{1}{3}\rho^2\right) e^{-\rho}, \\ \bar{\mathcal{E}} &= \frac{1}{\rho} [1 - (1 + \rho) e^{-2\rho}], \\ \bar{\mathcal{G}} &= (1 + \rho) e^{-\rho}. \end{aligned}$$

Несколько сложнее интеграл \mathcal{E}' , но и его можно вычислить элементарными методами. С этой целью при выполнении первого интегрирования по координатам второго электрона надо ввести сферическую систему координат с началом в ядре b и полярной осью, направленной по радиус-вектору r_{b1} , тогда нетрудно показать, что

$$\frac{1}{\pi} \int \frac{1}{r_{12}} e^{-2r_{b2}} d\tau_2 = \bar{\mathcal{E}}(r_{b1}).$$

Последующее интегрирование по координатам первого электрона приводит к уже вычисленным интегралам, только некоторые из них содержат в экспоненте лишний множитель 2. Окончательный результат имеет вид

$$\bar{\mathcal{E}}' = \frac{1}{\rho} \left[1 - \left(1 + \frac{11}{8}\rho + \frac{3}{4}\rho^2 + \frac{1}{6}\rho^3 \right) e^{-2\rho} \right].$$

Действительные трудности связаны с вычислением обменного интеграла $\bar{\mathcal{G}}'$, который нельзя свести к элементарным функциям. Результат интегрирования, впервые полученный Сагиурой, можно записать в виде

$$\bar{\mathcal{G}}' = \left(\frac{5}{8} - \frac{23}{20}\rho - \frac{3}{5}\rho^2 - \frac{1}{15}\rho^3 \right) e^{-2\rho} + \frac{6}{5} \frac{\Phi(\rho)}{\rho},$$

где

$$\Phi(\rho) = S^2(\rho) (\ln \rho + C) - S^2(-\rho) E_1(4\rho) + 2S(\rho) S(-\rho) E_1(2\rho),$$

а через $E_1(z)$ обозначена интегральная экспонента

$$E_1(z) = \int_z^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt.$$

Нетрудно убедиться, что при больших r интеграл $\bar{\mathcal{G}}'$ ведет себя как $e^{-2\rho}$ и что в предельном случае $\rho=0$ он равен $\bar{\mathcal{G}}'(0) = 5/8$ в полном согласии с теорией основного состояния атома гелия, для которого расстояние между протонами равно нулю (см. задачу 154).

Результаты числовых расчетов собраны в приводимой ниже таблице.

ρ	γ	$-E$	R
1,3	1,145	1,120	1,133
1,4	1,152	1,127	1,214
1,5	1,160	1,131	1,293
1,6	1,164	1,137	1,374
1,7	1,166	1,139	1,458
1,8	1,164	1,137	1,546
1,9	1,161	1,134	1,635
2,0	1,156	1,129	1,730

Энергия связи молекулы достигает максимума вблизи точки $R=1,46$ ат. ед., что соответствует равновесному расстоянию $R_0=0,77 \text{ \AA}$ (экспериментальное значение равно $0,742 \text{ \AA}$). Энергию молекулы $E=-1,139$ следует сравнить с суммарной энергией двух невзаимодействующих атомов водорода, находящихся в основном состоянии, $2E_0=-1$. Если обозначить энергию нулевых колебаний молекулы через $\frac{1}{2} \hbar \omega$, то энергию диссоциации можно будет записать в виде

$$D = 2E_0 - \left(E + \frac{1}{2} \hbar \omega \right) = 0,139 - \frac{1}{2} \hbar \omega.$$

Чтобы найти энергию нулевых колебаний, можно воспользоваться той же процедурой, что и в случае иона H_2^+ (задача 44), правда, теперь наша таблица определяет аппроксимирующую энергетическую параболу значительно менее точно. Таким образом мы получаем с точностью до $\pm 5\%$ значение $0,010$ ат. ед., или $0,27 \text{ эВ}$, которое полностью согласуется с экспериментальным значением $\hbar \omega = 0,54 \text{ эВ}$. Отсюда для энергии диссоциации находим

$$D = 0,138 \text{ ат. ед.} = 3,75 \text{ эВ},$$

в то время как по экспериментальным данным $D = 4,45 \text{ эВ}$. Согласие между теорией и экспериментом не следует считать слишком плохим по причинам, которые мы разъяснили в задаче 44, где аналогичная ситуация рассматривалась для иона H_2^+ .

Замечание. Следует отметить, что параметр γ с ростом величины R (или ρ) стремится к единице, а функция f — к волновой функции основного состояния. В первоначальном методе Гайтлера — Лондона это значение использовалось на протяжении всего расчета, так что там не было второго вариационного параметра γ . В этом грубом приближении для энергии диссоциации и равновесного расстояния между ядрами получались соответственно значения $2,90 \text{ эВ}$ и $0,88 \text{ \AA}$. Все возрастающие значения параметра γ , определяемые согласно нашей таблице при адиабатическом сближении двух атомов, описывают стягивание электронных волновых функций в процессе образования молекулы.

Литература

- Heitler W., London F., Zs. Phys., 44, 455 (1927).
 Вычисление интеграла \mathcal{G}' :
 Sugiura Y., Zs. Phys., 45 484 (1927).
 Вариационный параметр γ :
 Wang S. C., Phys. Rev., 31, 579 (1928);
 Rosen N., Phys. Rev., 38, 2099 (1931).
 Улучшенные вариационные расчеты:
 James H. M., Coolidge A. S., Journ. Chem. Phys., 1, 825 (1933); 3, 129 (1935).

Задача 164. Рассеяние одинаковых частиц

Пучок частиц с зарядом e сталкивается с покоящейся мишенью, состоящей из частиц того же сорта. Как сравнить угловое распределение сталкивающихся частиц, ожидаемое в классической физике, с угловым распределением, полученным с помощью квантовой механики, если при выводе последнего учитывалась симметрия волновой функции? Рассмотреть этот вопрос для столкновения неполяризованных частиц со спином 0, 1 и $1/2$.

Решение. Амплитуда резерфордского рассеяния в системе центра масс сталкивающихся частиц была получена в задаче 110. Она имеет следующий вид:

$$f(\vartheta) = -\frac{\kappa^*}{2k^*} e^{2i\eta_0} e^{-i\kappa^* \ln \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \frac{1}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}}, \quad \eta_0 = \Gamma(1 + i\kappa^*). \quad (164.1)$$

Величины κ^* и k^* относятся к системе центра масс, причем

$$\kappa^* = \frac{e^2}{\hbar v}, \quad k^* = \frac{m^* v}{\hbar}, \quad E^* = \frac{\hbar^2 k^{*2}}{2m^*}, \quad (164.2)$$

где m^* — приведенная масса двух одинаковых частиц, $m^* = 1/2 m$. Относительная скорость v не зависит от выбора системы отсчета, поэтому для величин κ , k и E , относящихся к лабораторной системе, можно написать

$$\kappa^* = \kappa, \quad k^* = \frac{1}{2} k, \quad E^* = \frac{1}{2} E. \quad (164.3)$$

Отсюда следует

$$f(\vartheta) = -\frac{\kappa}{k} e^{2i\eta_0} e^{-i\kappa \ln \sin^2 \frac{\vartheta}{2}} \frac{1}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}}, \quad \eta_0 = \Gamma(1 + i\kappa). \quad (164.4)$$

Угол рассеяния в лабораторной системе Θ связан с углом рассеяния ϑ в системе центра масс соотношением

$$\Theta = \frac{1}{2} \vartheta. \quad (164.5)$$

Следовательно, для элемента телесного угла можно написать

$$d\omega = 2\pi \sin \vartheta d\vartheta = 2\pi \cdot 4 \cos \Theta \sin \Theta d\Theta = 4 \cos \Theta d\Omega. \quad (164.6)$$

С учетом этих замечаний дифференциальное сечение Резерфордского рассеяния принимает в лабораторной системе вид

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = 4 \cos \Theta \left(\frac{\kappa}{k} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \Theta}, \quad (164.7)$$

где

$$\frac{\kappa}{k} = \frac{e^2}{mv^2} = \frac{e^2}{2E}.$$

Даже с точки зрения классической механики эта формула нуждается в существенных исправлениях. Действительно, если обе сталкивающиеся частицы одинаковы, то рассеиваемую частицу нельзя отличить от частицы, выбитой из мишени: обе они дают равноценный вклад в сечение рассеяния. Так как, согласно соотношению (164.5), сталкивающиеся частицы разлетаются под прямым углом, то частица, выбитая из мишени, летит под углом $\pi/2 - \Theta$ к направлению падающего пучка, а вместо формулы (164.7) мы должны написать

$$\frac{d\sigma_{кл}}{d\Omega} = 4 \cos \Theta \left(\frac{\kappa}{k} \right)^2 \left(\frac{1}{\sin^4 \Theta} + \frac{1}{\cos^4 \Theta} \right). \quad (164.8)$$

Именно это классическое выражение следует сравнивать с квантовомеханическими результатами, которые будут получены ниже.

Согласно законам квантовой механики, мы должны складывать не интенсивности (т. е. эффективные сечения), а амплитуды. Пусть $u(\mathbf{r})$ — несимметризованная волновая функция в системе центра масс, а \mathbf{r} — радиус-вектор относительного положения частиц. Асимптотика волновой функции, если отвлечься от логарифмического искажения фазы, имеет вид

$$u(\mathbf{r}) \rightarrow e^{ik^*z} + f(\vartheta) \frac{e^{ik^*r}}{r}.$$

Фигурирующую в этом выражении плоскую волну можно записать в виде

$$e^{ik^*(z_1 - z_2)}.$$

Последнее выражение описывает две частицы, движущиеся вдоль оси z : одна движется со скоростью $1/2v$, а другая — со скоростью $-1/2v$. Если ввести сюда множитель, описывающий движение центра масс

$$e^{ik^*(z_1 + z_2)},$$

то у нас получится плоская волна

$$e^{2ik^*z_1} = e^{ikz_1},$$

описывающая движение частицы 1 (налетающая частица), при этом частица 2 (частица-мишень) будет находиться в состоянии покоя. Приведенные рассуждения относились к несимметризованной волновой функции двухчастичной системы. Чтобы произвести симметризацию, мы должны заменить $u(\mathbf{r})$ на

$$u(\mathbf{r}) + \varepsilon u(-\mathbf{r}),$$

где

$$\varepsilon = \pm 1.$$

Для сферической волны в асимптотическом выражении волновой функции это означает замену $f(\vartheta)$ на

$$f(\vartheta) + \varepsilon f(\pi - \vartheta).$$

Отметим, что величина r при переходе к симметризованному выражению остается неизменной. Таким образом, используя выражение (164.4), имеем

$$f(\vartheta) + \varepsilon f(\pi - \vartheta) = -\frac{e^2}{mv^2} e^{2i\eta_0} \left\{ e^{\frac{-i\kappa \ln \sin^2 \frac{\vartheta}{2}}{\sin^2 \frac{\vartheta}{2}}} + \varepsilon e^{\frac{-i\kappa \ln \cos^2 \frac{\vartheta}{2}}{\cos^2 \frac{\vartheta}{2}}} \right\}, \quad (164.9)$$

и следовательно, формула (164.8) для классического сечения рассеяния заменяется теперь формулой

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4 \cos \Theta \left(\frac{e^2}{mv^2} \right)^2 \left| e^{\frac{-i\kappa \ln \sin^2 \Theta}{\sin^2 \Theta}} + \varepsilon e^{\frac{-i\kappa \ln \cos^2 \Theta}{\cos^2 \Theta}} \right|^2, \quad (164.10)$$

которая после элементарных преобразований принимает вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4 \cos \Theta \left(\frac{e^2}{mv^2} \right)^2 \left\{ \frac{1}{\sin^4 \Theta} + \frac{1}{\cos^4 \Theta} + \varepsilon \frac{2 \cos \left(\frac{e^2}{\hbar v} \ln \operatorname{tg}^2 \Theta \right)}{\sin^2 \Theta \cos^2 \Theta} \right\}. \quad (164.11)$$

Мы видим, что от классического выражения полученная формула отличается наличием интерференционного числа. Чтобы сравнить классическую и квантовую формулы для дифференциального сечения рассеяния, удобно рассмотреть отношение

$$\frac{d\sigma}{d\sigma_{\text{кл}}} = 1 + \varepsilon \frac{2 \operatorname{tg}^2 \Theta \cos \left(\frac{e^2}{\hbar v} \ln \operatorname{tg}^2 \Theta \right)}{1 + \operatorname{tg}^4 \Theta}. \quad (164.12)$$

В заключение мы должны решить, какая часть первично неполяризованного пучка описывается симметричной амплитудой, а какая — антисимметричной. Если обе сталкивающиеся частицы являются фермионами со спином $1/2$ каждая (два протона или два электрона), то их полная волновая функция должна быть антисимметричной, и поэтому симметричное по спину и антисим-

метричное по пространству триплетное состояние будет участвовать в рассеянии с весом $3/4$, а обладающее противоположной симметрией синглетное состояние — с весом $1/4$. Таким образом, имеем

$$d\sigma = \frac{3}{4} d\sigma_- + \frac{1}{4} d\sigma_+,$$

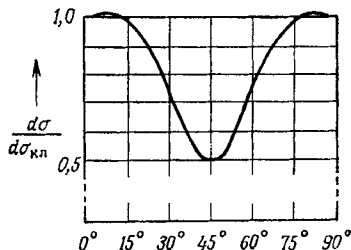
где индексы \pm соответствуют двум возможным значениям величины ϵ в формуле (164.11). Следовательно, в экспериментах с неполяризованными пучками

$$\epsilon_{\text{эфф}} = -\frac{3}{4} + \frac{1}{4} = -\frac{1}{2}$$

и

$$\frac{d\sigma}{d\sigma_{\text{кл}}} = 1 - \frac{\text{tg}^2 \Theta \cos \left(\frac{e^2}{\hbar v} \ln \text{tg}^2 \Theta \right)}{1 + \text{tg}^4 \Theta}. \quad (164.13)$$

График этой функции для случая рассеяния протонов на протонах при энергии $E = 100$ кэВ показан на фиг. 64. Практически 100 кэВ — это то наибольшее значение энергии, при котором в рассеянии еще не появляются сколько-нибудь заметным образом аномалии, возникающие благодаря короткодействующим ядерным силам притяжения между протонами (см. следующую задачу). В рассматриваемом нами случае $\kappa = 0,50$. Кроме того, выражение (164.13) не меняется при замене $\Theta \rightarrow \pi/2 - \Theta$, поэтому при вычислениях достаточно ограничиться интервалом углов $0 < \Theta \leq 45^\circ$. Если перейти к существенно более низким энергиям, величина κ может стать настолько большой, что в рассматриваемом интервале у функции $\cos(\kappa \ln \text{tg}^2 \Theta)$ появится несколько осцилляций. Для очень больших значений величины κ эти осцилляции будут настолько быстрыми, что их нельзя будет разрешить экспериментальным путем, и сечение рассеяния будет описываться классической формулой.



Фиг. 64. Рассеяние двух одинаковых фермионов.

Показана угловая зависимость отношения квантового к классическому сечению. В окрестностях 0° и 90° имеется бесконечное число убывающих по амплитуде осцилляций

Если сталкивающиеся частицы являются бозонами и спин каждой из них равен нулю (например, две α -частицы или два π -мезона), то возможно только пространственно симметричное состояние с $\epsilon = +1$. Разумеется, для α -частиц e^2 необходимо

заменить на $4e^2$. Если же обе частицы являются бозонами и спин каждой из них равен 1 (например, два дейтрона), то возможны спиновые состояния с суммарным спином 2 (вес $5/9$), 1 (вес $3/9$) и 0 (вес $1/9$), причем в первом и в последнем случаях волновая функция должна быть пространственно симметричной. Таким образом, имеем

$$\epsilon_{\text{эфф}} = \left(\frac{5}{9} + \frac{1}{9} \right) - \frac{3}{9} = + \frac{1}{3}$$

и

$$\frac{d\sigma}{d\sigma_{\text{кл}}} = 1 + \frac{2}{3} \frac{\text{tg}^2 \Theta \cos \left(\frac{e^2}{\hbar v} \ln \text{tg}^2 \Theta \right)}{1 + \text{tg}^4 \Theta}. \quad (164.14)$$

Замечание. Симметризованное классическое выражение (164.8) впервые было использовано в работе Дарвина [Darwin C. G., Proc. Roy. Soc., 120A, 631 (1928)]. Вывод квантовомеханической формулы принадлежит Мотту [Mott N. F., Proc. Roy. Soc., 126, 259 (1930)]. Экспериментальная проверка этой формулы применительно к рассеянию α -частиц была осуществлена Чэдвиком [Chadwick J., Proc. Roy. Soc., 128A, 114 (1930)], а также Блэкеттом и Чэмпиеном [Blackett P. M. S., Champion F. C., Proc. Roy. Soc., 130, 380 (1931)], а для протонов это сделал Гертцен [Gerhlsen C., Ann. Phys., 9, 769 (1931)].

Задача 165. Аномальное рассеяние протонов на протонах

При энергиях, превышающих 100 кэВ, в рассеянии протонов на протонах начинают появляться аномалии, обусловленные наличием короткодействующих ядерных сил притяжения. Описать это аномальное рассеяние с помощью дополнительного сдвига фазы δ_0 парциальной волны с $l=0$.

Решение. Без учета симметризации вопрос об аномальном рассеянии заряженных частиц рассматривался нами в задаче 112. Согласно полученным там результатам [формула (112.5)], амплитуда рассеяния в системе центра масс сталкивающихся частиц имеет вид

$$f(\Theta) = - \frac{\chi}{2k^* \sin^2 \frac{\Theta}{2}} e^{-i\chi \ln \sin^2 \frac{\Theta}{2}} + \frac{1}{2ik^*} (e^{2i\delta_0} - 1). \quad (165.1)$$

Для дальнейшего удобно ввести обозначения

$$f(\Theta) = f_R(\Theta) + f_a, \quad (165.2)$$

где первый член описывает резерфордское рассеяние, вызванное кулоновским взаимодействием, а второй член

$$f_a = \frac{1}{2ik^*} (e^{2i\delta_0} - 1) = \frac{1}{k^*} e^{i\delta_0} \sin \delta_0 \quad (165.3)$$

представляет собой амплитуду аномального рассеяния. Учитывая далее, что

$$k^* = \frac{1}{2} k, \quad \frac{1}{2} \vartheta = \Theta \quad (165.4)$$

и что, согласно результатам предыдущей задачи, симметризация приводит к соотношению

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4 \cos \Theta \left[\frac{3}{4} |f(\vartheta) - f(\pi - \vartheta)|^2 + \frac{1}{4} |f(\vartheta) + f(\pi - \vartheta)|^2 \right], \quad (165.5)$$

мы получаем

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} = 4 \cos \Theta \left[\frac{3}{4} |f_R(\vartheta) - f_R(\pi - \vartheta)|^2 + \right. \\ \left. + \frac{1}{4} |f_R(\vartheta) + f_R(\pi - \vartheta) + 2f_a|^2 \right]. \end{aligned} \quad (165.6)$$

Так как амплитуда аномального рассеяния не зависит от угла ϑ , то из первого члена формулы (165.5) она выпадает. Замечательно, что даже при более высоких энергиях, когда в амплитуду аномального рассеяния f_a дают вклад состояния с высшими значениями момента и когда

$$f_a = \frac{1}{2ik^*} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{2i(\eta_l - \eta_0)} (e^{2i\delta_l} - 1) P_l(\cos \vartheta),$$

ни одно из состояний с четным l не дает вклада в триплетный член и ни одно из состояний с нечетным l не дает вклада в синглетный член. Этот результат является прямым следствием соотношения

$$P_l(\cos(\pi - \vartheta)) = (-1)^l P_l(\cos \vartheta).$$

Таким образом, в сечение рассеяния дают вклад лишь те члены, которые соответствуют состояниям

$${}^1S, {}^3P, {}^1D, {}^3F, {}^1G, \dots$$

Этот результат находится в полном согласии с принципом Паули, если его применять по отдельности к каждой из парциальных волн (состояния ${}^3S, {}^1P, \dots$ запрещены)

Выражение (165.6) нетрудно привести к виду

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} = 4 \cos \Theta \{ |f_R(\vartheta)|^2 + |f_R(\pi - \vartheta)|^2 - \operatorname{Re} [f_R(\vartheta) f_R^*(\pi - \vartheta)] + \\ + \operatorname{Re} [f_a f_R^*(\vartheta)] + \operatorname{Re} [f_a f_R^*(\pi - \vartheta)] + |f_a|^2 \}. \end{aligned} \quad (165.7)$$

В первой строке здесь собраны члены, обусловленные кулоновским рассеянием; они подробно рассматривались нами в предыдущей задаче. Во второй строке имеются два члена, связанные с интерференцией кулоновского и аномального рассеяния, и член, обусловленный собственно аномальным рассеянием. Если вспомнить явный вид амплитуд f_R и f_a , то эти три последние члена

нетрудно вычислить:

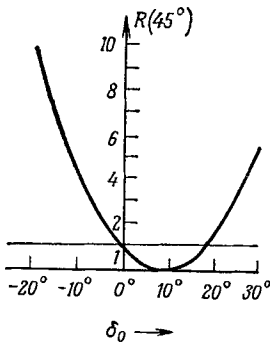
$$\begin{aligned} \operatorname{Re} [f a f_R^* (\theta)] &= -\frac{2\kappa \sin \delta_0}{k^2 \sin^2 \theta} \cos (\delta_0 + \kappa \ln \sin^2 \theta), \\ \operatorname{Re} [f a f_R^* (\pi - \theta)] &= -\frac{2\kappa \sin \delta_0}{k^2 \cos^2 \theta} \cos (\delta_0 + \kappa \ln \cos^2 \theta), \\ |f_a|^2 &= \frac{4}{k^2} \sin^2 \delta_0. \end{aligned}$$

Обычно вводится отношение сечений рассеяния

$$R = \frac{d\sigma}{d\sigma_C}, \quad (165.8)$$

где $d\sigma_C$ означает сечение кулоновского рассеяния, выведенное в предыдущей задаче [члены, стоящие в первой строке формулы (165.7)]. Мы имеем

$$R = 1 + \frac{-\frac{2}{\kappa} \sin \delta_0 \left[\frac{\cos (\delta_0 + \kappa \ln \sin^2 \theta)}{\sin^2 \theta} + \frac{\cos (\delta_0 + \kappa \ln \cos^2 \theta)}{\cos^2 \theta} \right] + \frac{4}{\kappa^2} \sin^2 \delta_0}{\frac{1}{\sin^4 \theta} + \frac{1}{\cos^4 \theta} - \frac{\cos (\kappa \ln \operatorname{tg}^2 \theta)}{\sin^2 \theta \cos^2 \theta}}. \quad (165.9)$$



Ф и г. 65. Зависимость отношения фактического к чисто кулоновскому сечению рассеяния при $\Theta = 45^\circ$ от сдвига фазы δ_0 .

Положительным (отрицательным) значениям δ_0 соответствуют короткодействующие силы притяжения (отталкивания)

величина $\kappa = 0,316$, т. е. еще довольно велика, и дополнительный сдвиг фазы рассеяния δ_0 будет очень мал, поэтому второй член в выражении (165.10) значительно превосходит третий член,

Этой формулой можно пользоваться до тех пор, пока не играет роли 3P -рассеяние, т. е. до тех пор, пока энергия протонов не превышает несколько МэВ.

Из формулы (165.9) следует, что для углов $\Theta = 0^\circ$ и $\Theta = 90^\circ$ отношение $R = 1$; для этих углов конечный вклад аномального рассеяния подавляется сингулярностью, имеющейся в кулоновском рассеянии.

Более важен анализ выражения для величины R при $\Theta = 45^\circ$. В этом случае имеем

$$R(45^\circ) = 1 - \frac{2}{\kappa} \sin \delta_0 \cos (\delta_0 - \ln 2) + \frac{1}{\kappa^2} \sin^2 \delta_0. \quad (165.10)$$

Прежде всего рассмотрим приведенное выражение для достаточно малой энергии протонов, скажем для 250 кэВ. Тогда

и, наблюдая рассеяние под углом 45° , мы легко можем решить вопрос о знаке дополнительных сил. Если мы имеем дело с силами притяжения, то $\delta_0 > 0$ и $R(45^\circ) < 1$, если же мы имеем дело с силами отталкивания, то $\delta_0 < 0$ и $R(45^\circ) > 1$. Эксперимент показывает, что ядерные силы являются силами притяжения.

Перейдем теперь к более высоким энергиям. Пусть, например, $E = 1$ МэВ ($\kappa = 0,158$). Вычисленная по формуле (165.10) зависимость отношения $R(45^\circ)$ от сдвига фазы δ_0 показана на фиг. 65. Так как мы уже решили, что $\delta_0 > 0$ (притяжение), то эта кривая однозначно определяет сдвиг фазы δ_0 , если $R(45^\circ) > 1$. Именно так и обстоит дело в случае $E = 1$ МэВ. По данным эксперимента $R(45^\circ) = 4,6$ и, следовательно, $\delta_0 = 32^\circ$. Действуя таким образом, мы однозначно находим зависимость дополнительного сдвига фазы рассеяния δ_0 от энергии.

С помощью формулы (165.9) и найденных значений δ_0 мы можем теперь вычислить отношение R для других углов рассеяния и полученные таким путем угловые распределения для каждого значения энергии сравнить с данными эксперимента. Тем самым теория подвергается более тщательной проверке. Как оказалось, теория и эксперимент прекрасно согласуются друг с другом.

Литература

Blatt J. M., Jackson J. D., Rev. Mod. Phys., 22, 77 (1950).
Flügge S., Ergebn. exakt. Naturwiss., 26, 165 (1952).

Задача 166. Неупругое рассеяние

Пучок протонов сталкивается с мишенью, состоящей из атомов щелочного металла. Рассматривая взаимодействие между протоном и атомом в качестве возмущения, найти сечение неупругого рассеяния, сопровождающееся возбуждением оптического электрона. Считать, что оптический электрон первоначально находился в своем основном состоянии. Отдачу атомного остова не учитывать (бесконечно тяжелое ядро).

Решение. Мы будем пользоваться атомными единицами ($\hbar = 1$, $e = 1$, $m = 1$) и обозначим посредством \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 радиус-векторы соответственно протона и электрона. Тогда гамильтониан можно представить в виде суммы трех слагаемых:

$$H = H_1 + H_2 + H_{12}, \quad (166.1)$$

где первое слагаемое,

$$H_1 = -\frac{1}{2M} \nabla_1^2, \quad (166.2)$$

описывает свободное движение протона массы M ; второе слагаемое,

$$H_2 = -\frac{1}{2} \nabla_2^2 + V(r_2), \quad (166.3)$$

описывает движение оптического электрона в поле атомного остова и третье слагаемое,

$$H_{12} = -V(r_1) - \frac{1}{r_{12}}, \quad (166.4)$$

описывает взаимодействие протона с атомным остовом и подвергающимся возбуждению оптическим электроном. Это последнее слагаемое гамильтониана следует рассматривать в качестве возмущения. Такой подход к задаче правомерен лишь до тех пор, пока энергия протона не слишком велика и он не может возбудить ни одного электрона атомного остова.

Обозначим через u_ν собственную функцию оператора H_2 , принадлежащую собственному значению W_ν (здесь индекс ν стоит вместо совокупности квантовых чисел n, l, m , причем значение $\nu = 0$ относится к основному состоянию). Мы имеем

$$H_2 u_\nu(r_2) = W_\nu u_\nu(r_2). \quad (166.5)$$

Пусть далее $\hbar \mathbf{k}$ есть импульс налетающего протона, тогда в нулевом порядке теории возмущений, т. е. в пренебрежении оператором H_{12} , решение уравнения Шредингера будет иметь вид

$$U^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1} u_0(\mathbf{r}_2). \quad (166.6)$$

Волновую функцию первого приближения можно разложить по полной системе ортонормированных функций $\{u_\nu\}$:

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1} u_0(\mathbf{r}_2) + \sum_{\mu} F_{\mu}(\mathbf{r}_1) u_{\mu}(\mathbf{r}_2). \quad (166.7)$$

Здесь знак суммы следует понимать как суммирование по состояниям дискретного спектра и интегрирование по состояниям непрерывного спектра, а штрих означает, что суммирование не распространяется на состояние с $\mu = 0$.

Подставляя выражение (166.7) в уравнение Шредингера, получаем

$$\begin{aligned} \sum_{\mu} \{ \nabla_1^2 F_{\mu} + [k^2 - 2M(W_{\mu} - W_0)] F_{\mu} - 2MH_{12} F_{\mu} \} u_{\mu}(\mathbf{r}_2) = \\ = 2MH_{12} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1} u_0(\mathbf{r}_2). \end{aligned}$$

В первом порядке теории возмущений мы можем пренебречь в левой части этого уравнения членом с H_{12} . Вводя обозначение

$$k_{\mu}^2 = k^2 - 2M(W_{\mu} - W_0), \quad (166.8)$$

мы, таким образом, получаем

$$\sum_{\mu}' \{ \nabla_{\mu}^2 F_{\mu}(\mathbf{r}_1) + k_{\mu}^2 F_{\mu}(\mathbf{r}_1) \} u_{\mu}(\mathbf{r}_2) = 2MH_{12} e^{ik \cdot \mathbf{r}_1} u_0(\mathbf{r}_2). \quad (166.9)$$

Умножая последнее уравнение на функцию $u_{\nu}^*(\mathbf{r}_2)$ и интегрируя по переменной \mathbf{r}_2 , приходим к совокупности независимых дифференциальных уравнений для функций F_{ν} :

$$\nabla_1^2 F_{\nu} + k_{\nu}^2 F_{\nu} = \Phi_{\nu}(\mathbf{r}_1), \quad (166.10)$$

где

$$\Phi_{\nu}(\mathbf{r}_1) = 2Me^{ik \cdot \mathbf{r}_1} \int u_{\nu}^*(\mathbf{r}_2) H_{12} u_0(\mathbf{r}_2) d^3 r_2. \quad (166.11)$$

Каждое из уравнений (166.10) представляет собой неоднородное дифференциальное уравнение и его можно решить с помощью функции Грина, т. е. мы имеем

$$F_{\nu}(\mathbf{r}_1) = -\frac{1}{4\pi} \int \frac{e^{ik_{\nu} |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'|} \Phi_{\nu}(\mathbf{r}') d^3 r'. \quad (166.12)$$

Чтобы получить формулу для сечения рассеяния, мы должны теперь исследовать асимптотическое поведение решения (166.12) при $r_1 \rightarrow \infty$. Интеграл в выражении (166.11) для функции $\Phi_{\nu}(\mathbf{r}_1)$ при больших значениях r_1 убывает как $1/r_1^2$, так как оператор H_{12} представляет собой энергию взаимодействия протона с нейтральным атомом и, согласно равенству (166.4), стремится к $-(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2)/r_1^3$ при $r_1 \gg r_2$. Таким образом, наличие множителя $\Phi_{\nu}(\mathbf{r}')$ в подынтегральном выражении (166.12) практически ограничивает размеры области интегрирования размерами атома. Поэтому при $r_1 \rightarrow \infty$ можно предположить, что $r_1 \gg r'$ и, следовательно,

$$F_{\nu}(\mathbf{r}_1) \rightarrow -\frac{e^{ik_{\nu} r_1}}{4\pi r_1} \int e^{-ik_{\nu} r' \cos(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}')} \Phi_{\nu}(\mathbf{r}') d^3 r'. \quad (166.13)$$

Последнее выражение представляет собой расходящуюся сферическую волну, которую можно записать в виде

$$F_{\nu}(\mathbf{r}_1) \rightarrow f(\vartheta_1) \frac{e^{ik_{\nu} r_1}}{r_1}, \quad (166.14)$$

где амплитуда рассеяния

$$f(\vartheta_1) = -\frac{1}{4\pi} \int e^{-ik_{\nu} r' \cos(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}')} \Phi_{\nu}(\mathbf{r}') d^3 r' \quad (166.15)$$

является функцией угла, на который рассеивается протон. Отсюда следует, что дифференциальное сечение неупругого рассеяния протона, сопровождающееся переходом оптического электрона

в щелочном металле в состоянии ν , будет равно

$$d\sigma = \frac{k_\nu}{k} |f(\vartheta_1)|^2 d\Omega_1. \quad (166.16)$$

Множитель k_ν/k появляется здесь из-за того, что скорость рассеянного протона, а следовательно, и связанная с ним плотность тока вероятности меньше соответствующих величин, относящихся к налетающему протону. Этот вывод сразу же следует из формулы (166.8), если ее интерпретировать как закон сохранения энергии.

Остановимся теперь несколько подробнее на вопросе об угловом распределении неупруго рассеянных протонов. Прежде всего введем в экспоненту (166.15) вектор \mathbf{k}_ν , направление которого совпадает с направлением вектора \mathbf{r}_1 , положив

$$k_\nu r' \cos(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') = \mathbf{k}_\nu \cdot \mathbf{r}'.$$

Используя соотношения (166.11) и (166.4), получаем

$$f(\vartheta_1) = -\frac{M}{2\pi} \int d^3r' e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}_\nu)\cdot\mathbf{r}'} \times \\ \times \int u_\nu^*(\mathbf{r}_2) \left\{ -V(r') - \frac{1}{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}_2|} \right\} u_0(\mathbf{r}_2) d^3r_2.$$

Очевидно, что член с $V(r')$ не даст вклада в неупругое рассеяние ($\nu \neq 0$). Формально это следует из ортогональности функций u_ν , а физически обусловлено тем, что взаимодействие протона с атомным остовом не может привести к возбуждению электрона, который не является частью этого остова. Вводя далее переданный импульс $\mathbf{K}_\nu = \mathbf{k} - \mathbf{k}_\nu$, получаем

$$f(\vartheta_1) = \frac{M}{2\pi} \int d^3r_2 u_\nu^*(\mathbf{r}_2) u_0(\mathbf{r}_2) \int \frac{e^{i\mathbf{K}_\nu \cdot \mathbf{r}'}}{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}_2|} d^3r'. \quad (166.17)$$

Под знаком внутреннего интеграла стоит выражение, состоящее из двух сомножителей, каждый из которых можно разложить в ряд по сферическим гармоникам, зависящим от углов ϑ' и ϑ'_2 соответственно между векторами \mathbf{K}_ν и \mathbf{r}' и векторами \mathbf{r}_2 и \mathbf{r}' :

$$e^{i\mathbf{K}_\nu \cdot \mathbf{r}'} = \frac{1}{K_\nu r'} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l j_l(K_\nu r') Y_{l,0}(\vartheta')$$

и

$$\frac{1}{|\mathbf{r}'-\mathbf{r}_2|} = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{\frac{4\pi}{2n+1}} R_n Y_{n,0}(\vartheta'_2),$$

где

$$R_n = \begin{cases} \frac{1}{r_2} \left(\frac{r'}{r_2}\right)^n, & r' < r_2, \\ \frac{1}{r'} \left(\frac{r_2}{r'}\right)^n, & r' > r_2. \end{cases} \quad (166.18)$$

Выбирая направление вектора K_v в качестве направления полярной оси сферической системы координат, мы можем применить к функции $Y_{n,0}(\vartheta_2)$ теорему сложения сферических гармоник:

$$Y_{n,0}(\vartheta_2) = \sqrt{\frac{4\pi}{2n+1}} \sum_{m=-n}^{+n} Y_{n,m}^*(\vartheta', \varphi') Y_{n,m}(\vartheta_2, \varphi_2),$$

где ϑ' , φ' и ϑ_2 , φ_2 соответственно сферические углы векторов r' и r_2 . Теперь во внутреннем интеграле в формуле (166.17) можно произвести интегрирование по углам. Мы имеем

$$\int \frac{e^{iK_v \cdot r'}}{|r' - r_2|} d^3 r' = \sum_{l=0}^{\infty} \int_0^{\infty} r'^2 \frac{4\pi}{K_v r'} \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} i^l j_l(K_v r') R_l Y_{l,0}(\vartheta_2) dr'.$$

Воспользовавшись обозначением

$$g_l(r_2) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} i^l \int_0^{\infty} r'^2 \frac{j_l(K_v r')}{K_v r'} R_l dr', \quad (166.19)$$

вместо (166.17) получим

$$f(\vartheta_1) = 2M \int u_v^*(r_2) u_0(r_2) \sum_{l=0}^{\infty} g_l(r_2) Y_{l,0}(\vartheta_2) d^3 r_2. \quad (166.20)$$

Интеграл (166.19) вычисляется точно. Взяв в качестве переменной интегрирования величину $y = K_v r'$ и положив $x = K_v r_2$, с учетом соотношений (166.18) находим

$$g_l(r_2) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} i^l \frac{1}{K_v^2} \left\{ x^{-l-1} \int_0^x y^{l+1} j_l(y) dy + x^l \int_x^{\infty} y^{-l} j_l(y) dy \right\}.$$

Последние интегралы хорошо известны из теории бесселевых функций:

$$\int_0^x y^{l+1} j_l(y) dy = x^{l+1} j_{l+1}(x),$$

$$\int_x^{\infty} y^{-l} j_l(y) dy = x^{-l} j_{l-1}(x),$$

так что выражение, стоящее в фигурных скобках, оказывается равным

$$j_{l+1}(x) + j_{l-1}(x) = (2l+1) \frac{j_l(x)}{x}.$$

Следовательно,

$$g_l(r_2) = \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l \frac{j_l(K_\nu r_2)}{K_\nu^3 r_2}. \quad (166.21)$$

В расчете амплитуды рассеяния (166.20) можно сделать еще один шаг. Мы знаем, что состояния u_ν содержат в качестве множителя сферическую гармонику. Так как основное состояние u_0 не зависит от углов, то под знаком интеграла в (166.20) стоят произведения различных пар сферических гармоник. В силу ортогональности последних от суммы, фигурирующей в (166.20), после интегрирования останется только один член. Учитывая далее, что

$$u_\nu \equiv \frac{1}{r_2} \chi_{n,l}(r_2) Y_{l,m}(\vartheta_2, \varphi_2) \quad (166.22a)$$

(ось квантования направлена по вектору K_ν) и что

$$u_0 = \frac{1}{r_2} \chi_0(r_2), \quad (166.22b)$$

получаем

$$f(\vartheta_1) = \frac{2M}{K_\nu^2} \delta_{m_0} \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l \int_0^\infty \frac{j_l(K_\nu r_2)}{K_\nu r_2} \chi_{n,l}(r_2) \chi_0(r_2) dr_2. \quad (166.23)$$

Состояния с различными значениями квантового числа m вырождены. При неупругом рассеянии оптический электрон может перейти только в такое возбужденное состояние, которое является линейной комбинацией этих вырожденных состояний и в котором проекция момента количества движения на направление переданного импульса K_ν равна нулю. Что касается квантового числа l , то здесь никакого правила отбора не существует. В заключение следует отметить, что амплитуда (166.23) действительно зависит от угла рассеяния ϑ_1 , так как от этого угла зависит величина K_ν :

$$K_\nu^2 = k^2 + k_\nu^2 - 2kk_\nu \cos \vartheta_1. \quad (166.24)$$

Входящую сюда величину k_ν можно определить из закона сохранения энергии (166.8); от угла ϑ_1 она, разумеется, не зависит.

Замечание. Эти же результаты можно получить, применив к рассмотренному процессу *золотое правило Ферми* (см. задачу 183).

Б. Очень большое число частиц. Квантовая статистика

Задача 167. Электронный газ в металле

В грубом приближении можно считать, что электроны проводимости в металле свободно движутся внутри потенциального ящика, стенки которого совпадают с поверхностью, ограничивающей рассматриваемый кусок металла, и препятствуют выходу электронов проводимости из него. Для куска серебра (плотность $\rho = 10,5$ г/см³, атомный вес 108, один электрон проводимости на один ион атома серебра), имеющего форму куба, найти

- а) максимальную энергию ζ электрона, когда рассматриваемый электронный газ находится в основном состоянии,
 - б) среднюю энергию электронов,
 - в) давление электронного газа.
- Тепловым возбуждением пренебречь.

Решение. Допустимые значения энергии электронов в куске серебра, имеющем форму куба, объем которого равен L^3 , согласно задаче 18, определяются формулой

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2), \quad (167.1)$$

где n_1, n_2, n_3 — положительные целые числа (1, 2, 3, ...). В силу принципа Паули в каждом состоянии, описываемом тройкой квантовых чисел (n_1, n_2, n_3) , имеется два электрона с противоположной ориентацией спинов. Так как в рассматриваемом куске металла мы должны распределить очень большое число электронов, то в дальнейшем нам придется иметь дело в основном с очень большими значениями квантовых чисел.

Рассмотрим пространство с координатами n_1, n_2, n_3 . Каждой точке с целочисленными координатами, расположенной в первом октанте этого пространства, соответствует некоторое состояние с энергией (167.1). Обозначим через n расстояние от начала координат до рассматриваемой точки нашего пространства, тогда

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = n^2, \quad (167.2)$$

и можно написать, что число точек первого октанта с целочисленными координатами, заключенных между сферами радиуса n и $n + dn$, равно

$$\frac{1}{8} \cdot 4\pi n^2 dn = \frac{\pi}{2} n^2 dn.$$

„Помещая“ в каждую из этих точек по два электрона с противоположной ориентацией спинов, получаем, что между n и $n + dn$ имеются $\pi n^2 dn$ электронов. Учитывая, далее, что энергия (167.1) зависит только от n :

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2, \quad dE = \frac{\hbar^2 \pi^2}{mL^2} n dn, \quad (167.3)$$

для числа электронов, энергии которых заключены между значениями E и $E + dE$, находим формулу

$$dN = \pi n^2 dn = \pi \sqrt{\frac{2mL^2 E}{\hbar^2 \pi^2}} \cdot \frac{mL^2}{\hbar^2 \pi^2} dE,$$

или

$$dN = \sqrt{2m} \frac{mL^3}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{E} dE. \quad (167.4)$$

а. Максимальная энергия ζ электрона, когда рассматриваемый электронный газ находится в основном состоянии, определяется полным числом электронов проводимости N . Для данного куска металла число N — фиксированная постоянная. Таким образом, имеем

$$N = \sqrt{2m} \frac{mL^3}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\zeta} \sqrt{E} dE. \quad (167.5)$$

Если ввести в рассмотрение плотность

$$\mathcal{N}^0 = \frac{N}{L^3}, \quad (167.6)$$

то тогда получаются формулы, в которые не входит объем рассматриваемого куска металла:

$$\mathcal{N}^0 = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m\zeta}{\hbar^2} \right)^{3/2}, \quad (167.7a)$$

или

$$\zeta = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 \mathcal{N}^0)^{2/3}. \quad (167.7b)$$

Поскольку $\mathcal{N}^0 = \rho/M$, где M — масса одного атома серебра ($M = 1,80 \cdot 10^{-22}$ г), то в нашем случае

$$\mathcal{N}^0 = 5,85 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$$

и формула (167.7b) дает для максимальной энергии значение

$$\zeta = 8,80 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} = 5,55 \text{ эВ}.$$

Эта энергия значительно больше энергии теплового движения ($kT = 0,026$ эВ при 300 К), поэтому тепловое возбуждение может лишь очень незначительно изменить распределение электронов по энергиям. Этот эффект, называемый вырождением электронного газа (ферми-газ), физически обусловлен малостью массы электрона, входящей в знаменатель выражения (167.76).

В общем случае максимальную энергию ζ называют *энергией Ферми* электронного газа.

б. Средняя энергия электронов определяется формулой

$$\bar{E} = \frac{\int E dN}{\int dN}, \quad (167.8)$$

отсюда с учетом (167.4) получаем

$$\bar{E} = \frac{\int_0^{\zeta} V \bar{E} E dE}{\int_0^{\zeta} V \bar{E} dE} = \frac{3}{5} \zeta. \quad (167.9)$$

в. Давление электронного газа всегда можно определить, не прибегая к термодинамике. Для этого достаточно рассмотреть работу, которая производится при уменьшении объема газа V на величину dV :

$$dW = p dV.$$

Вся эта работа идет на увеличение суммарной энергии газа U на величину dU , поэтому можно написать¹⁾

$$dW = dU.$$

С другой стороны, суммарную энергию частиц газа (при $T = 0$) можно записать в виде

$$U = N \bar{E} = \frac{3}{5} N \zeta. \quad (167.10)$$

Согласно формуле (167.76), энергия Ферми ζ зависит от отношения $\mathcal{N} = N/V$ и, следовательно, от объема V :

$$U \sim V^{-2/3}, \quad \frac{dU}{U} = -\frac{2}{3} \frac{dV}{V}.$$

¹⁾ Выше предполагается, что сжатие газа производится адиабатически.—
Прим. ред.

Отсюда для давления получаем

$$p = -\frac{dU}{dV} = \frac{2}{3} \frac{U}{V} = \frac{2}{5} \mathcal{N}^2 \zeta. \quad (167.11)$$

Подставляя в эту формулу значения \mathcal{N} и ζ , определенные выше, находим

$$p = 2,06 \cdot 10^{11} \text{ дин/см}^2,$$

что составляет примерно 200 000 атм. Это чудовищное давление уравновешивается кулоновскими силами притяжения между электронами проводимости и ионами, находящимися в узлах кристаллической решетки.

Задача 168. Парамагнитная восприимчивость металла

Для нулевой температуры определить парамагнитную восприимчивость металла, рассматривая электроны проводимости как ферми-газ. Поляризуемость ионов кристаллической решетки не учитывать.

Решение. Согласно результатам предыдущей задачи, электроны проводимости образуют ферми-газ, причем предельная энергия электронов (энергия Ферми) определяется выражением

$$\zeta = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 \mathcal{N})^{2/3}, \quad (168.1)$$

где \mathcal{N} — число электронов проводимости в единице объема. Разность энергий ΔE двух соседних электронных уровней находится из соотношения

$$4\pi p^2 \Delta p = 4\pi \sqrt{2mE} m \Delta E = \frac{(2\pi\hbar)^3}{V}. \quad (168.2)$$

Отсюда для уровней, расположенных вблизи энергии Ферми, получаем

$$\Delta E_0 = \frac{4}{3} \frac{\zeta}{\mathcal{N}^2 V}. \quad (168.3)$$

Действительно, можно написать

$$\Delta E_0 \sim \zeta^{-1/2} = \frac{\zeta}{\zeta^{3/2}},$$

а вместо $\zeta^{3/2}$ подставить выражение (168.1). При нулевой температуре все уровни, для которых $E < \zeta$, заняты парами электронов с противоположно ориентированными спинами, а все уровни, для которых $E > \zeta$, свободны.

Если теперь поместить металл в магнитное поле, то можно добиться выигрыша в энергии, разделяя электронные пары и ориентируя спины каждой пары электронов параллельно магнитному полю \mathcal{H} . Если разделены ν таких электронных пар, то выигрыш в энергии, очевидно, составит

$$2\nu \cdot \mu \mathcal{H}, \quad \text{где } \mu = \frac{e\hbar}{2mc}. \quad (168.4)$$

Разделение электронной пары, разумеется, возможно только в том случае, если хотя бы один из принадлежащих ей электронов переводится на незанятый уровень, лежащий выше уровня $E = \zeta$. Но это означает, что выигрыш в энергии (168.4) тратится на увеличение кинетической энергии электронов. Обратившись к фиг. 66, видим, что на разделение первой пары, т. е. на перевод одного электрона с самого верхнего занятого уровня на самый нижний незанятый уровень, требуется энергия ΔE_0 , на разделение второй пары — энергия $3\Delta E_0$, на разделение третьей пары — энергия $5\Delta E_0$ и т. д. В общем случае на разделение ν пар требуется затратить энергию

$$[1 + 3 + 5 + \dots + (2\nu - 1)] \Delta E_0 = \nu^2 \Delta E_0. \quad (168.5)$$

Состояние равновесия достигается при условии, что полное изменение энергии W , вызванное магнитным полем,

$$W = -2\nu\mu\mathcal{H} + \nu^2\Delta E_0, \quad (168.6)$$

имеет минимум, т. е.

$$\frac{dW}{d\nu} = -2\mu\mathcal{H} + 2\nu\Delta E_0 = 0.$$

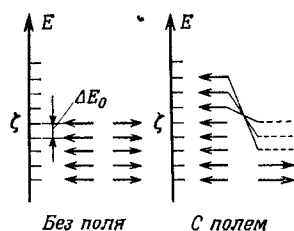
Таким образом, при равновесии

$$\nu = \frac{\mu\mathcal{H}}{\Delta E_0}, \quad (168.7)$$

причем

$$W_{\text{мин}} = -\frac{(\mu\mathcal{H})^2}{\Delta E_0}. \quad (168.8)$$

Если производится разделение большего числа пар, то полная энергия электронного газа вновь возрастает. При равновесии



Фиг. 66. Спин-флип вблизи поверхности Ферми, вызванный магнитным полем.

суммарный магнитный момент куска металла будет равен

$$\mathcal{M} = 2\nu \cdot \mu = \frac{2\mu^2 \mathcal{H}}{\Delta E_0},$$

и, вспоминая определение парамагнитной восприимчивости, можно написать

$$\chi = \frac{\mathcal{M}}{\mathcal{H}V} = \frac{2\mu^2}{V\Delta E_0}. \quad (168.9)$$

Учитывая теперь соотношения (168.3) и (168.1), находим

$$\chi = \frac{e^2}{4\pi mc^2} \left(\frac{3\phi^r}{\pi} \right)^{1/3}. \quad (168.10)$$

Для получения числовых значений плотность электронов проводимости следует выразить через плотность металла ρ , массу одного его атома $m_H A$ (A —атомный вес) и его валентность z . Мы, очевидно, имеем

$$\phi^r = \frac{z\rho}{m_H A},$$

и, следовательно,

$$\chi_{\text{пара}} = 1,86 \cdot 10^{-6} \left(\frac{z\rho}{A} \right)^{1/3}. \quad (168.11)$$

При сравнении этого результата с экспериментальными данными из последних необходимо вычесть диамагнитную восприимчивость ионов кристаллической решетки.

Замечание. В задаче 160 была вычислена диамагнитная восприимчивость неона, практически она должна совпадать с диамагнитной восприимчивостью ионов Na^+ . Как было найдено,

$$\chi_{\text{диа}} = -5,61 \cdot 10^{-6} \text{ см}^3/\text{моль}.$$

Учитывая, что плотность металлического натрия составляет примерно $1 \text{ г/см}^3 = 1/23 \text{ моль/см}^3$, в принятых нами единицах получаем

$$\chi_{\text{диа}} = -0,25 \cdot 10^{-6}.$$

С другой стороны, согласно (168.11), вклад электронов проводимости в этом случае равен

$$\chi_{\text{пара}} = +0,66 \cdot 10^{-6}.$$

Мы видим, что обе величины имеют один и тот же порядок, поэтому некоторые металлы (например, цезий) могут оказаться даже диамагнетиками.

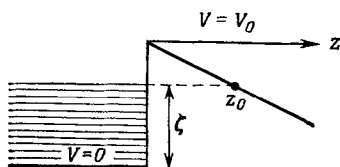
Литература

Френкель Я. И., *Zs. Phys.*, 49, 31 (1928). [См. также Френкель Я. И., Введение в теорию металлов, Физматгиз, М., 1958, стр. 106 и далее.—Прим. ред.]

Задача 169. Холодная эмиссия без учета сил электростатического изображения

Определить плотность тока электронов, эмиттируемых металлической поверхностью под действием сильного электрического поля \mathcal{E} . Температуру считать низкой, структуру кристаллической решетки, а также силы электростатического изображения не учитывать.

Решение. Пусть эмиттирующая поверхность совпадает с плоскостью $z=0$. Внутри металла ($z < 0$) электроны проводимости имеют постоянную потенциальную энергию $V=0$, вне металла ($z > 0$) их потенциальная энергия в отсутствие электрического



Фиг. 67. Холодная эмиссия.

Слева: электронные уровни внутри металла заполнены вплоть до энергии Ферми ζ ; справа: ход потенциала вне металла.

поля равна V_0 . Внутри металла электроны проводимости в совокупности образуют ферми-газ в основном состоянии и занимают все энергетические уровни вплоть до уровня, соответствующего энергии Ферми ζ . При наличии электрического поля потенциальная энергия электронов вне металла описывается выражением

$$V(z) = V_0 - e\mathcal{E}z. \quad (169.1)$$

Обращаясь к фиг. 67, мы видим, что при наличии поля вне металла образуется потенциальный барьер. Пусть E_z означает ту часть энергии электрона, которая соответствует z -компоненте его скорости, тогда для коэффициента прохождения T , рассчитанного в приближении ВКБ, можно написать

$$T = \exp \left\{ -2 \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_0^{z_0} \sqrt{V(z) - E_z} dz \right\}, \quad (169.2)$$

где $V(z)$ определяется формулой (169.1), а

$$E_z = \frac{m}{2} v_z^2, \quad z_0 = \frac{V_0 - E_z}{e\mathcal{E}}. \quad (169.3)$$

Выражение (169.2) быстро убывает при убывании E_z , а фигури-

рующийся в нем интеграл легко вычисляется и мы получаем

$$T = \exp \left\{ -\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar e \mathcal{E}} (V_0 - E_z)^{3/2} \right\}. \quad (169.4)$$

Плотность тока электронов можно определить по формуле

$$j = e \int v_z T dn, \quad (169.5)$$

где dn — число электронов проводимости в элементе импульсного пространства $dp_x dp_y dp_z$, отнесенное к 1см^3 . Для ферми-газа внутри ферми-сферы, т. е. при условии

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 \leq 2m\zeta, \quad (169.6)$$

получаем

$$dn = 2 \frac{dp_x dp_y dp_z}{h^3}, \quad h = 2\pi\hbar,$$

вне ферми-сферы имеем

$$dn = 0.$$

Если в импульсном пространстве ввести цилиндрические координаты ρ , φ , p_z и принять во внимание, что

$$p_x = \rho \cos \varphi, \quad p_y = \rho \sin \varphi, \quad \rho^2 + p_z^2 \leq 2m\zeta,$$

то интеграл (169.5) можно записать в виде

$$j = \frac{2e}{h^3} 2\pi \int_0^{\sqrt{2m\zeta}} dp_z \int_0^{\sqrt{2m\zeta - p_z^2}} \rho \left(\frac{p_z}{m} \right) T d\rho,$$

причем выше интегрирование распространяется на все электроны, для которых $v_z > 0$. С помощью введения новой переменной

$$\varepsilon = \zeta - E_z \quad (169.7)$$

последний интеграл упрощается, и мы получаем

$$j = \frac{4\pi em}{h^3} \int_0^{\zeta} \varepsilon T(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (169.8)$$

где

$$T(\varepsilon) = \exp \left\{ -\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m}}{\hbar e \mathcal{E}} (V_0 - \zeta + \varepsilon)^{3/2} \right\}. \quad (169.9)$$

Для оценки интеграла (169.8) воспользуемся тем обстоятельством, что коэффициент прохождения $T(\varepsilon)$ имеет максимальное значение при $\varepsilon = 0$ (это соответствует максимуму энергии электронов $E_z = \zeta$), а затем по мере роста ε быстро убывает. По

этой причине основной вклад в интеграл (169.8) дают электроны с малыми значениями ε , и мы можем воспользоваться разложением

$$(V_0 - \zeta + \varepsilon)^{3/2} = (V_0 - \zeta)^{3/2} + \frac{3}{2} \varepsilon (V_0 - \zeta)^{1/2} + \dots$$

Вводя теперь обозначение

$$2 \frac{\sqrt{2m}}{\hbar e \mathcal{E}} (V_0 - \zeta)^{3/2} = q, \quad (169.10)$$

находим

$$T = e^{-\frac{2}{3}q} \exp\left(-\frac{q\varepsilon}{V_0 - \zeta}\right)$$

и

$$j = \frac{4\pi em}{h^3} e^{-\frac{2}{3}q} \int_0^\zeta \varepsilon \exp\left(-\frac{q\varepsilon}{V_0 - \zeta}\right) d\varepsilon.$$

Здесь снова подынтегральное выражение быстро убывает с ростом ε , поэтому, не внося заметной ошибки, интегрирование можно распространить до бесконечности, так что окончательно

$$j = \frac{4\pi em}{h^3} \frac{(V_0 - \zeta)^2}{q^2} e^{-\frac{2}{3}q}. \quad (169.11)$$

Числовой пример. Согласно формулам (169.10) и (169.11), плотность тока электронов быстро падает с ростом работы выхода $V_0 - \zeta$ и с уменьшением напряженности электрического поля \mathcal{E} . Если напряженность поля измерять в вольтах на сантиметр, работу выхода — в электронвольтах, а плотность тока — в амперах на квадратный сантиметр, то формулы (169.10) и (169.11) примут вид

$$\begin{aligned} q &= 1,047 \cdot 10^8 \frac{(V_0 - \zeta)^{3/2}}{\mathcal{E}}, \\ j &= 1,59 \cdot 10^{10} \frac{(V_0 - \zeta)^2}{q^2} e^{-\frac{2}{3}q}. \end{aligned} \quad (169.12)$$

Если величина q имеет порядок 1, то для плотности тока следует ожидать значение порядка 10^{10} А/см². Это значит, что почти каждый электрон, ударяющийся о поверхность, покидает металл. Разумеется, в этом случае ни сама модель, ни приближенный метод расчета совершенно непригодны. С увеличением значений q плотность тока быстро падает, поэтому разумно спросить, для каких значений напряженности поля при разных значениях работы выхода мы можем ожидать плотность тока 1 А/см²? При-

веденная ниже таблица дает ответ на поставленный вопрос:

$$\begin{array}{rcl} \mathcal{E} = 10^6 \text{ В/см} & V_0 - \zeta = 0,083 \text{ эВ} \\ 10^7 & 0,43 \\ 10^8 & 2,19 \end{array}$$

Так как для металлов работа выхода $V_0 - \zeta$ всегда имеет порядок нескольких электронвольт, то для полей, напряженность которых меньше 10^8 В/см, холодная эмиссия должна отсутствовать. Эксперименты же показывают, что пороговое значение напряженности поля имеет порядок 10^6 В/см. Такое сильное расхождение, разумеется, нельзя объяснить тепловыми возбуждениями ферми-газа: учет их позволяет понизить работу выхода на величину порядка $1/10 - 1/100$ эВ ($kT \sim 1/30$ эВ при обычных температурах). Как показано в следующей задаче, полученное противоречие удается устранить, приняв во внимание силы электростатического изображения.

Задача 170. Холодная эмиссия с учетом сил электростатического изображения

Высота потенциального барьера, препятствующего холодной эмиссии, значительно понижается из-за сил электростатического изображения. Выяснить, как влияют эти силы на величину плотности тока холодной эмиссии.

Решение. Силы электростатического изображения возникают вследствие искажения поверхностного заряда, вызванного присутствием электрона в области $z > 0$. Если величина z значительно больше постоянной кристаллической решетки, то мы можем не принимать во внимание детали внутренней структуры металла и рассматривать его как непрерывную среду. В этом случае силы электростатического изображения рассчитываются методами классической электростатики и мы можем написать

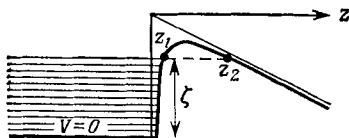
$$V_{\text{из}} = -\frac{e^2}{4z}. \quad (170.1)$$

Для малых значений z это выражение непригодно: при $z = 0$ оно просто расходится и, следовательно, теряет физический смысл. Однако в дальнейшем мы будем пользоваться приведенным выражением во всей области изменения z , допускаемая при этом ошибка не скажется на наших результатах, так как плотность тока холодной эмиссии зависит исключительно от ширины и высоты потенциального барьера в той области значений энергии, где высота *больше* энергии электрона.

С учетом сказанного потенциальная энергия электрона, когда он находится вне металла, имеет вид

$$V(z) = V_0 - \frac{e^2}{4z} - e\mathcal{E}z. \quad (170.2)$$

(Используются обозначения предыдущей задачи, см. также фиг. 68.) Выражение (170.2) интересует нас лишь в области между z_1



Фиг. 68. Холодная эмиссия с учетом сил электростатического изображения.

и z_2 , где z_1 и z_2 — корни квадратного уравнения $V(z) = E_z$. Мы, очевидно, имеем

$$z_{1,2} = \frac{V_0 - E_z}{2e\mathcal{E}} \pm \sqrt{\frac{(V_0 - E_z)^2}{4e^2\mathcal{E}^2} - \frac{e}{4\mathcal{E}}}. \quad (170.3)$$

Оба корня будут действительными, если

$$e\mathcal{E} < \left(\frac{V_0 - E_z}{e}\right)^2.$$

Заметим, что это условие выполняется даже для полей, напряженность которых имеет порядок 10^9 В/см. Для больших значений напряженности высота барьера будет ниже энергии Ферми электронного газа в металле. В экспериментах используются поля, напряженность которых не превосходит 10^7 В/см, поэтому можно считать, что

$$e\mathcal{E} \ll \left(\frac{V_0 - E_z}{e}\right)^2, \quad (170.4)$$

и вместо радикала (170.3) взять соответствующее разложение. Таким образом, имеем

$$z_1 = \frac{e^2}{4(V_0 - E_z)} \quad \text{и} \quad z_2 = z_0 - z_1, \quad (170.5)$$

где

$$z_0 = \frac{V_0 - E_z}{e\mathcal{E}}, \quad (170.6)$$

причем $z_1 \ll z_2$. Благодаря силам электростатического изображения вершина потенциального барьера, согласно формуле (170.2), сдвигается теперь из точки $z=0$ в точку $z = V_0/e\mathcal{E}$, а его вы-

сота равна теперь не V_0 , а

$$V_0 - e\sqrt{e\mathcal{E}}.$$

Согласно условию (170.4), это приводит не столько к понижению потенциального барьера, сколько делает его вершину более пологой, и мы можем ожидать, что при прочих равных условиях коэффициент прохождения будет иметь теперь значительно большую величину. Повторяя рассуждения предыдущей задачи, можно убедиться, что основной вклад в плотность тока холодной эмиссии будут давать те электроны, энергия которых близка к значению $E_z = \zeta$. Для таких энергий величина $z_1 = e^2/[4(V_0 - \zeta)]$ во всяком случае не меньше постоянной кристаллической решетки, поэтому наличие расходимости при $z=0$ в потенциале сил электростатического изображения для дальнейшего не имеет никакого значения.

Снова используя приближение ВКБ, можно написать для коэффициента прохождения выражение вида

$$T = \exp \left\{ -2 \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \int_{z_1}^{z_2} \sqrt{V(z) - E_z} dz \right\}.$$

Учитывая далее, что

$$V(z) - E_z = \frac{e\mathcal{E}}{z} (z - z_1)(z_2 - z),$$

получаем

$$-\frac{\hbar}{2\sqrt{2me\mathcal{E}}} \ln T = \int_{z_1}^{z_2} \sqrt{\frac{(z - z_1)(z_2 - z)}{z}} dz. \quad (170.7)$$

Этот интеграл относится к интегралам эллиптического типа, и его можно выразить через табличные интегралы. Введем вместо z новую переменную $x = (z - z_1)/(z_2 - z_1)$, в результате наш интеграл преобразуется к виду

$$(z_2 - z_1)^{3/2} \int_0^1 \sqrt{\frac{x(1-x)}{x+c}} dx,$$

где

$$c = \frac{z_1}{z_2 - z_1}.$$

Положим далее

$$\frac{z_2 - z_1}{z_2} = k^2 \quad (170.8)$$

и

$$x = \frac{(1 - k^2) \sin^2 \varphi}{1 - k^2 \sin^2 \varphi},$$

тогда вместо интеграла, стоящего в правой части равенства (170.7), можно написать

$$\frac{2k^4}{\sqrt{1 - k^2}} z_1^{3/2} \int_0^{\pi/2} \frac{\sin^2 \varphi \cos^2 \varphi}{(1 - k^2 \sin^2 \varphi)^{5/2}} d\varphi. \quad (170.9)$$

В свою очередь этот последний интеграл можно представить в виде линейной комбинации двух полных эллиптических интегралов $E(k)$ и $K(k)$:

$$\int_0^{\pi/2} \frac{\sin^2 \varphi \cos^2 \varphi}{(1 - k^2 \sin^2 \varphi)^{5/2}} d\varphi = \frac{1}{3k^4} \left[\frac{2 - k^2}{1 - k^2} E(k) - 2K(k) \right]. \quad (170.10)$$

В справедливости равенства (170.10) можно убедиться следующим образом. Если ввести обозначение

$$1 - k^2 \sin^2 \varphi = \Delta^2,$$

то полные эллиптические интегралы запишутся в виде

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\Delta}, \quad E(k) = \int_0^{\pi/2} \Delta d\varphi.$$

Далее путем дифференцирования нетрудно проверить справедливость тождества

$$3k^2 \frac{\sin^2 \varphi \cos^2 \varphi}{\Delta^5} = \frac{2 - k^2}{k^2 (1 - k^2)} \Delta - \frac{2}{k^2 \Delta} + \\ + \frac{d}{d\varphi} \left[\sin \varphi \cos \varphi \left(\frac{1}{\Delta^3} - \frac{2 - k^2}{(1 - k^2) \Delta} \right) \right].$$

Если теперь проинтегрировать это тождество почленно по φ , то в результате получим соотношение

$$3k^2 \int_0^{\pi/2} \frac{\sin^2 \varphi \cos^2 \varphi}{\Delta^5} d\varphi = \frac{2 - k^2}{k^2 (1 - k^2)} E(k) - \frac{2}{k^2} K(k),$$

из которого сразу следует равенство (170.10).

Суммируя наши результаты, можно записать формулы (170.7) и (170.10) в виде

$$-\frac{\hbar}{2 \sqrt{2me\phi}} \ln T = \frac{2}{3} z_2^{3/2} [(2 - k^2) E(k) - 2(1 - k^2) K(k)]. \quad (170.11)$$

Эта формула допускает дальнейшие упрощения. Действительно, $z_1 \ll z_2$, следовательно, $k^2 \approx 1$ и параметр k^2 можно заменить параметром

$$k'^2 = 1 - k^2 = \frac{z_1}{z_2} \ll 1, \quad (170.12)$$

а затем разложить правую часть формулы (170.11) в быстро сходящийся ряд по степеням этого нового параметра. Мы имеем¹⁾

$$K(k) = \Lambda + \frac{1}{4}(\Lambda - 1)k'^2 + \dots,$$

$$E(k) = 1 + \frac{1}{2}\left(\Lambda - \frac{1}{2}\right)k'^2 + \dots,$$

причем выше $\Lambda = \ln(4/k')$. Подставляя эти ряды в правую часть (170.11), находим

$$\frac{2}{3}z_2^{3/2} \left[1 + k'^2 \left(\frac{3}{4} - \frac{3}{2} \ln \frac{4}{k'} \right) \right] =$$

$$= \frac{2}{3}z_0^{3/2} \left[1 - \frac{3}{2}k'^2 \left(\frac{1}{2} + \ln \frac{4}{k'} \right) \right].$$

Если бы $k' = 0$, то у нас получилось бы для коэффициента прохождения T прежнее значение (169.9), найденное без учета сил электростатического изображения. Обозначим это значение через T_0 , тогда

$$T = T_0^{1-\lambda}, \quad (170.13)$$

где

$$\lambda = \frac{3}{2}k'^2 \left(\frac{1}{2} + \ln \frac{4}{k'} \right). \quad (170.14)$$

Нам осталось, используя новое значение коэффициента прохождения T , оценить интеграл, фигурирующий в формуле для плотности тока (169.8). Как и в предыдущей задаче, основной вклад в плотность тока холодной эмиссии дают электроны, для которых значения E_z лежат вблизи точки $E_z = \zeta$, по этой причине мы можем разложить величину λ в ряд в окрестности точки $E_z = \zeta$, т. е. в окрестности точки $\varepsilon = 0$, и ограничиться в дальнейшем членом, линейно зависящим от ε . Практически это означает, что мы полагаем

$$k'^2 \approx \left(\frac{z_1}{z_0} \right)_{E_z = \zeta} = \frac{e^3 \mathcal{G}}{4(V_0 - \zeta)^2}, \quad (170.15)$$

а интегрирование выполняем так же, как и в задаче 169. В ре-

¹⁾ См. справочник: *Jahnke E., Emde F.*, 2 ed., 1933, p. 145. (Имеется перевод: *Янке Е., Эмде Ф., Лёви Ф.*, Специальные функции, изд-во „Наука“, М., 1968, стр. 114. — *Прим. перев.*)

зультате вместо выражения (169.11), которое мы обозначим через j_0 , у нас получится выражение вида

$$j = j_0 e^{\frac{2}{3} \lambda q}, \quad (170.16)$$

где $\lambda \ll 1$. При более точном расчете в формуле (170.16) появился бы дополнительный множитель

$$\left(1 - \frac{7}{3} \lambda + k'^2\right)^{-2}.$$

Разумеется, основную роль в формуле (170.16) играет экспонента.

Наш анализ закончим разбором числового примера. Если, как и в предыдущей задаче, напряженность поля \mathcal{E} измеряется в вольтах на сантиметр, а работа выхода $V_0 - \zeta$ — в электрон-вольтах, то наряду с соотношениями (169.12) мы имеем теперь соотношение

$$k'^2 = 3,58 \cdot 10^{-8} \frac{\mathcal{E}}{(V_0 - \zeta)^2}.$$

Предположим, что работа выхода $V_0 - \zeta = 3$ эВ, а напряженность поля $\mathcal{E} = 10^7$ В/см, тогда

$$q = 54,5, \quad k'^2 = 0,0397, \quad \lambda = 0,208, \\ e^{\frac{2}{3} \lambda q} = 1860, \quad j_0 = 0,9 \cdot 10^{-8} \text{ А/см}^2, \quad j = 1,7 \cdot 10^{-5} \text{ А/см}^2.$$

Задача 171. Белый карлик

Предположим, что температура белого карлика достаточно высока и поэтому все атомы практически полностью ионизованы. Кроме того, будем считать, что эта температура все еще настолько мала, что можно пренебречь давлением газа и давлением излучения по сравнению с давлением вырожденного электронного газа при абсолютном нуле температур (это второе предположение не является вполне удовлетворительным). Считая, что давление, соответствующее абсолютному нулю температур, уравновешивается силами гравитационного притяжения, найти распределение плотности вещества по объему звезды. Масса звезды предполагается заданной.

Решение. В сферически симметричной массе газа градиент давления в направлении радиуса должен равняться плотности гравитационных сил (барометрическая формула):

$$\frac{dp}{dr} = - \frac{GM_r}{r^2} \rho. \quad (171.1)$$

Здесь G —гравитационная постоянная, M_r —масса вещества, заключенная внутри сферы радиуса r , т. е.

$$M_r = 4\pi \int_0^r r'^2 \rho(r') dr', \quad (171.2)$$

и, наконец, $\rho(r)$ —плотность вещества, т. е. масса всех ионов и всех свободных электронов, находящихся в 1 см^3 звездного вещества. При полной ионизации в 1 см^3 наряду с \mathcal{N} электронами содержится \mathcal{N}/Z ионов (ядер), поэтому

$$\rho = \frac{\mathcal{N}}{Z} m_H A,$$

где $m_H A$ —масса нейтрального атома. Если вещество звезды содержит различные элементы, то фигурирующие здесь A и Z надо понимать как некие средние значения. В этой связи необходимо отметить, что отношение

$$\frac{A}{Z} = 2\alpha \quad (171.3)$$

почти не зависит от химического состава: величина α меняется от 1,0 до 1,3 при переходе от легких элементов к тяжелым, и лишь водород, для которого $\alpha = 1/2$, представляет в этом отношении исключение. Таким образом, плотность вещества

$$\rho = 2\alpha m_H \mathcal{N} \quad (171.4)$$

практически зависит лишь от плотности электронов.

Согласно результатам задачи 167, давление электронного газа при абсолютном нуле определяется формулой

$$p_e = \frac{2}{5} \mathcal{N} \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 \mathcal{N})^{2/3}. \quad (171.5)$$

Что касается давления газа ионов, p_i , то при абсолютном нуле оно (будучи пропорциональным $\mathcal{N}_i^{5/3}/m_i$) значительно меньше давления p_e :

$$\frac{p_i}{p_e} = \left(\frac{\mathcal{N}_i}{\mathcal{N}} \right)^{2/3} \frac{m}{m_i} = Z^{-2/3} \frac{m}{m_H A}.$$

Даже в случае водорода ($Z=1$, $A=1$) мы имеем $p_i/p_e = 1/1838$; для других элементов отношение p_i/p_e еще меньше. По этой причине мы пренебрежем величиной p_i и отождествим давление электронного газа p_e , фигурирующее в формуле (171.5) с полным давлением p .

Обойтись без рассмотрения температурных эффектов далеко не так просто. Газ можно считать сильно вырожденным только в том случае, когда $\zeta \gg kT$.

При этом условии давление газа практически не отличается от давления при абсолютном нуле. Для электронов энергия Ферми определяется формулой

$$\zeta = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{3\pi^2 \rho}{2\alpha m_H} \right)^{2/3} = 1,64 \left(\frac{\rho}{\alpha} \right)^{2/3} \text{ эВ.}$$

Вычисленные с помощью этой формулы значения ζ надо сравнить со значениями тепловой энергии. При температуре 10^6 К мы имеем $kT \approx 100$ эВ, и даже для плотности $\rho = 10^8$ обе величины оказываются одного порядка. При этом газ ионов вообще будет невырожденным, а его вклад в полное давление будет сравним с вкладом электронного газа. Что же касается радиационного давления, то для него справедлива формула

$$p_R = 2,52 \cdot 10^{-16} T^4 \text{ дин/см}^2.$$

С другой стороны, согласно (171.5) и (171.4), имеем

$$p_e = 3,16 \cdot 10^{12} \left(\frac{\rho}{\alpha} \right)^{5/3} \text{ дин/см}^2.$$

При $T = 10^6$ К радиационное давление по порядку величины равно 10^9 дин/см², и для плотностей вещества, с которыми мы сталкиваемся в белых карликах, его действительно можно не учитывать.

Комбинируя формулы (171.5) и (171.4), получаем уравнение состояния

$$p = f \rho^{5/3}, \quad (171.6)$$

где

$$f = \frac{\hbar^2}{10m} \left(\frac{3\pi^2}{2} \right)^{2/3} (\alpha m_H)^{-5/3} = 3,17 \cdot 10^{13} \alpha^{-5/3} \text{ г}^{-5/3} \text{ см}^4 \text{ с}^{-2}.$$

Когда функциональная связь между давлением и плотностью имеет вид

$$p = f \rho^{1 + \frac{1}{n}},$$

то говорят, что мы имеем *политропу* с показателем n . Таким образом, можно сказать, что состояние вещества в белом карлике описывается политропой с показателем $n = 3/2$.

Подставляя выражение (171.6) в условие равновесия (171.1), получаем

$$\frac{5}{3} f \rho^{2/3} \frac{d\rho}{dr} = - \frac{G\rho}{r^2} M_r.$$

Отсюда путем дифференцирования находим

$$\frac{5f}{3G} \frac{d}{dr} \left(r^2 \rho^{-1/3} \frac{d\rho}{dr} \right) = - 4\pi r^2 \rho. \quad (171.7)$$

Вместо плотности ρ удобно ввести безразмерную функцию

$$\varphi = \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{3/2}, \quad (171.8)$$

где ρ_0 — некоторая постоянная, а вместо радиуса r — безразмерную переменную

$$x = \frac{r}{r_1}, \quad (171.9)$$

где величина r_1 используется в качестве единицы длины и определяется соотношением

$$r_1^2 = \frac{5f}{8\pi G} \rho_0^{-1/3}. \quad (171.10)$$

В результате этих преобразований уравнение (171.7) приводится к виду, не зависящему ни от каких физических постоянных:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d\varphi}{dx} + \varphi^{3/2} = 0. \quad (171.11)$$

Если мы отождествим постоянную ρ_0 с плотностью вещества в центре звезды, то к уравнению (171.11) надо присоединить начальные условия

$$\varphi(0) = 1, \quad \varphi'(0) = 0. \quad (171.12)$$

Единственное решение нелинейного дифференциального уравнения (171.11), удовлетворяющее начальным условиям (171.12), находится путем численного интегрирования. Это решение монотонно убывает и в точке

$$x = X = 3,6537 \quad (171.13a)$$

обращается в нуль ($\varphi(X) = 0$). В этой же точке

$$\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{x=X} = -D = -0,206. \quad (171.13b)$$

Согласно соотношению (171.8), нуль функции φ определяет радиус звезды R . Зная радиус звезды, можно записать ее полную массу:

$$M = 4\pi \int_0^R r^2 \rho(r) dr = 4\pi \rho_0 r_1^3 \int_0^X x^2 \varphi^{3/2} dx.$$

Последний интеграл можно вычислить, не зная всех числовых значений функции $\varphi(x)$. Действительно, в силу уравнения (171.11) имеем

$$x^2 \varphi^{3/2} = -\frac{d}{dx} \left(x^2 \frac{d\varphi}{dx} \right),$$

поэтому

$$M = 4\pi \rho_0 r_1^3 X^2 D = 34,5 \rho_0 r_1^3. \quad (171.14)$$

Когда масса звезды известна из опыта, между величинами ρ_0 и r_1 в силу (171.10) и (171.14) имеется два соотношения:

$$\rho_0^{1/3} r_1^2 = a, \quad (171.15a)$$

где

$$a = \frac{5f}{8\pi G} = 9,46 \cdot 10^{18} \alpha^{-5/3} \text{ г}^{1/3} \text{ см},$$

и

$$\rho_0 r_1^3 = b, \quad (171.15b)$$

где

$$b = 0,0290M.$$

Отсюда

$$r_1 = ab^{-1/3}, \quad \rho_0 = b^2 a^{-3}, \quad (171.16)$$

так что радиус звезды R можно записать теперь в виде

$$R = r_1 X = 3,6537 r_1. \quad (171.17)$$

Для средней плотности звездного вещества имеем

$$\bar{\rho} = \frac{3D}{X} \rho_0 = 0,169 \rho_0, \quad (171.18)$$

следовательно, она составляет примерно $1/6$ плотности вещества в центре звезды.

Числовой пример. Наблюдения за движением Сириуса показывают, что Сириус В, входящий в состав этой двойной звезды, имеет массу, примерно равную массе Солнца, а именно $M = 1,94 \cdot 10^{33}$ г. Таким образом, в данном случае

$$\begin{aligned} r_1 &= 2,47 \cdot 10^8 \alpha^{-5/3} \text{ см}, \\ R &= 8,98 \cdot 10^8 \alpha^{-5/3} \text{ см}, \\ \rho_0 &= 3,73 \cdot 10^6 \alpha^5 \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}, \\ \bar{\rho} &= 6,15 \cdot 10^5 \alpha^5 \text{ г} \cdot \text{см}^{-3}. \end{aligned}$$

Известно также, что радиус Сириуса В составляет примерно $1/20$ радиуса Солнца ($R_0 = 6,95 \cdot 10^{10}$ см); этому в нашей модели соответствует значение $\alpha = 0,445$. Найденное значение довольно близко к значению $\alpha = 0,5$ для водородной звезды, хотя и располагается с неправильной стороны. Надо, однако, иметь в виду, что в нашей модели для радиуса звезды получается заниженное значение, так как при вычислениях мы не учитывали температурные эффекты и, следовательно, отбросили существенную часть давления. Фактически звезда должна раздуться до заметно больших размеров.

Задача 172. Приближение Томаса — Ферми

Рассчитать плотность электронов в атоме (или положительном ионе). Чтобы получить приемлемое приближение, предположите, что во всякой области, где электростатический потенциал можно считать практически постоянным, имеется достаточно большое число электронов, так что их допустимо рассматривать статистически.

Решение. В основу этой модели атома положено две идеи: одна заимствована из электростатики, другая — из квантовой статистики. Мы начнем с электростатической части нашей задачи. Если на расстоянии r от атомного ядра в единице объема содержится $n(r)$ электронов, то электростатический потенциал, создаваемый в пространстве совместным действием электронов и атомного ядра, удовлетворяет уравнению Пуассона. Таким образом, первое основное уравнение нашей задачи гласит:

$$\nabla^2 \Phi = 4\pi e \cdot n(r), \quad (172.1)$$

где $\rho(r) = -en(r)$ — плотность заряда электронного облака. На решение этого уравнения необходимо наложить два граничных условия: в непосредственной близости от ядра с зарядом Ze

$$\Phi = \frac{Ze}{r} \quad \text{при} \quad r \rightarrow 0, \quad (172.2)$$

и, кроме того, если R — радиус положительного иона с зарядом ze , то

$$\Phi = \frac{ze}{r} \quad \text{при} \quad r \geq R. \quad (172.3)$$

Фактическое значение радиуса положительного иона нам предстоит определить в дальнейшем.

На границе иона, т. е. в точках $r = R$, не должно быть никаких сингулярностей, поэтому здесь непрерывен не только потенциал, но и напряженность поля. В связи с этим граничное условие (172.3) можно переписать по-иному:

$$\Phi(R) = \frac{ze}{R} \quad \text{и} \quad \left(\frac{d\Phi}{dr} \right)_R = -\frac{ze}{R^2}. \quad (172.4)$$

Перейдем теперь к квантостатистической части нашей задачи. Рассматривая любой элементарный объем внутри атома (или иона), мы видим, что импульс p всякого находящегося в нем электрона связан с его энергией соотношением

$$E = \frac{p^2}{2m} - e\Phi(r).$$

Чтобы электрон был в связанном состоянии, эта энергия во внутренних областях атома, очевидно, не должна превышать потенциальную энергию $-e\Phi(R)$ на его границе. Отсюда следует, что импульс электрона, находящегося на расстоянии r от ядра, не может быть больше $p_{\text{макс}}$, где

$$\frac{p_{\text{макс}}^2}{2m} = e[\Phi(r) - \Phi(R)]. \quad (172.5)$$

Согласно же квантовой статистике, величина $p_{\text{макс}}$ связана с плотностью электронов $n(r)$ (см. задачу 167) соотношением

$$n = 2 \cdot \frac{4\pi}{3} \frac{p_{\text{макс}}^3}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (172.6)$$

Сравнение соотношений (172.5) и (172.6) приводит к другому основному уравнению нашей задачи:

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3} \{2me[\Phi(r) - \Phi(R)]\}^{3/2}. \quad (172.7)$$

Уравнения (172.1) и (172.7) в принципе позволяют определить обе неизвестные функции $n(r)$ и $\Phi(r)$. Исключая функцию $n(r)$ и пользуясь сферической симметрией задачи, получаем

$$\nabla^2\Phi \equiv \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2}(r\Phi) = \frac{4e}{3\pi\hbar^3} \{2me[\Phi(r) - \Phi(R)]\}^{3/2}.$$

Вводя вместо $\Phi(r)$ безразмерную функцию

$$\varphi(r) = \frac{r}{Ze} [\Phi(r) - \Phi(R)], \quad (172.8)$$

а вместо независимой переменной r безразмерную переменную

$$x = \frac{r}{a}, \quad (172.9)$$

где

$$a = \left(\frac{9\pi^2}{128Z}\right)^{1/3} \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,88534 Z^{-1/3} \frac{\hbar^2}{me^2},$$

приходим к универсальному дифференциальному уравнению

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{\varphi^{3/2}}{\sqrt{x}}. \quad (172.10)$$

Граничные условия (172.2) и (172.4) теперь принимают вид

$$\varphi(0) = 1 \quad (172.11)$$

и

$$\varphi(X) = 0, \quad X\varphi'(X) = -\frac{z}{Z}, \quad (172.12)$$

причем выше мы положили $X = R/a$.

Необходимо подчеркнуть, что при таких граничных условиях все $Z - z$ электронов действительно заключены внутри сферы радиуса R . В этом можно убедиться следующим образом. Из уравнения (172.7) и соотношения (172.9) следует

$$4\pi \int_0^R n(r) r^2 dr = Z \int_0^X \sqrt{x} \varphi^{3/2}(x) dx.$$

С помощью уравнения (172.10) функцию $\varphi^{3/2}$, фигурирующую в последнем интеграле, можно выразить через производную φ'' , так что этот интеграл будет равен

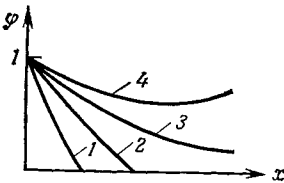
$$Z \int_0^X x\varphi'' dx = Z [x\varphi' - \varphi]_0^X = Z \{\varphi(0) + X\varphi'(X)\}.$$

С учетом же граничных условий (172.11) и (172.12) последнее выражение попросту равно

$$Z \left(1 - \frac{z}{Z}\right) = Z - z.$$

Таким образом, число электронов, заключенных внутри сферы радиуса R , действительно равно $Z - z$.

Мы свели нашу задачу к интегрированию универсального уравнения (172.10) при граничных условиях (172.11) и (172.12). Чтобы получить общее представление о разнообразии решений



Фиг. 69. Решения уравнения Томаса — Ферми (172.10), отличающиеся наклоном касательной в начальной точке.

этого дифференциального уравнения, целесообразно проинтегрировать его при одном и том же начальном условии $\varphi(0) = 1$ и различном наклоне касательных в начальной точке ($\varphi'(0) < 0$). Четыре таких решения показаны на фиг. 69. Кривым 1 и 2 соответствуют конечные радиусы X_1 и X_2 , так как в обоих случаях $\varphi'(X) < 0$. Оба указанных решения, согласно условию (172.12), описывают положительные ионы. Для нейтрального атома из (172.12) следует, что $\varphi'(X) = 0$. Это условие не удовлетворяется ни при каком конечном значении X . На фиг. 69 такому случаю соответствует кривая 3 (радиус атома бесконечен). Что касается кривой 4, то для свободных атомов или ионов она не имеет непосредственного физического смысла, однако с ее помощью можно

описывать атомы, связанные внутри кристаллической решетки (разумеется, граничные условия в этом случае будут совсем иными).

Ниже нас главным образом будет интересовать кривая 3, соответствующая нейтральному атому. Мы назовем полученное решение *стандартным* и будем обозначать его через $\varphi_0(x)$. Числовые значения функции $\varphi_0(x)$ приведены в нижеприведенной таблице. Наклон касательной в начальной точке в рассматриваемом случае характеризуется значением $\varphi'_0(0) = -1,58807$, а асимптотическое поведение имеет вид $\varphi_0(x) \rightarrow 144/x^3$ [заметим, кстати, что указанная асимптотика является точным решением дифференциального уравнения (172.10), однако при $x=0$ это решение имеет сингулярность]. Для практических целей приведенное асимптотическое выражение малоприсгодно, так как даже при $x=100$ оно отличается от точного решения $\varphi_0(x)$ примерно на 40%. Надо, однако, иметь в виду, что истинный потенциал нейтрального атома φ_0 должен убывать по мере роста x значительно быстрее, во всяком случае убывание должно быть экспоненциальным. Ошибка, свойственная модели Томаса — Ферми, как и любой другой статистической модели, быстро возрастает с уменьшением числа частиц. На больших расстояниях число частиц становится сколь угодно малым, поэтому нельзя ожидать, что там наше приближение, каким бы хорошим оно ни было во внутренних областях атома, будет оставаться пригодным.

Чтобы получить решения, близкие к стандартному, можно положить

$$\varphi(x) = \varphi_0(x) + k\eta_0(x), \quad (172.13)$$

так что для малых отклонений $k\eta_0$ из (172.10) получается линеаризованное уравнение

$$\frac{d^2\eta_0}{dx^2} = \frac{3}{2} \left(\frac{\varphi_0}{x} \right)^{1/2} \eta_0. \quad (172.14)$$

Кроме того, чтобы удовлетворить граничному условию (172.11), необходимо положить $\eta_0(0) = 0$. В целях стандартизации можно также потребовать, чтобы выполнялось равенство $\eta'_0(0) = 1$, а граничному условию (172.12) удовлетворить путем подходящего выбора параметра k . Таким образом, имеем

$$k = -\frac{\varphi_0(X)}{\eta_0(X)}, \quad (172.15a)$$

$$k = -\frac{1}{\eta_0(X)} \left(\frac{1}{ZX} + \varphi'_0(X) \right), \quad (172.15b)$$

$$k = \varphi'_0(0) - \varphi'_0(X). \quad (172.15в)$$

Соотношение (172.15a) устанавливает простую связь между параметром k и радиусом положительного иона X . Значения функции $\eta_0(x)$ и ее производной $\eta'_0(x)$ приведены в таблице.

x	$\varphi_0(x)$	$-\varphi_0'(x)$	$\eta_0(x)$	$\eta_0'(x)$
0,00	1,0000	1,5881	0,0000	1,0000
0,02	0,9720	1,3093	0,0200	1,0028
0,04	0,9470	1,1991	0,0401	1,0079
0,06	0,9238	1,1177	0,0604	1,0144
0,08	0,9022	1,0516	0,0807	1,0220
0,10	0,8817	0,9954	0,1012	1,0306
0,2	0,7931	0,7942	0,2069	1,0846
0,3	0,7206	0,6618	0,3186	1,1528
0,4	0,6595	0,5646	0,4378	1,2321
0,5	0,6070	0,4894	0,5654	1,3210
0,6	0,5612	0,4292	0,7023	1,4187
0,7	0,5208	0,3798	0,8494	1,5246
0,8	0,4849	0,3386	1,0075	1,6384
0,9	0,4529	0,3038	1,1773	1,7599
1,0	0,4240	0,2740	1,3597	1,8890
1,2	0,3742	0,2259	1,7650	2,1696
1,4	0,3329	0,1890	2,2296	2,4805
1,6	0,2981	0,1601	2,7593	2,8222
1,8	0,2685	0,1370	3,3605	3,1954
2,0	0,2430	0,1182	4,0396	3,6012
2,2	0,2210	0,1028	4,8032	4,0406
2,4	0,2017	0,0900	5,6582	4,5149
2,6	0,1848	0,0793	6,6116	5,0253
2,8	0,1699	0,0702	7,6708	5,5730
3,0	0,1566	0,0625	8,8434	6,1594
3,2	0,1448	0,0558	10,137	6,7858
3,4	0,1343	0,0501	11,561	7,4538
3,6	0,1247	0,0451	13,122	8,1646
3,8	0,1162	0,0408	14,829	8,9198
4,0	0,1084	0,0369	16,693	9,7208
4,5	0,0919	0,0293	22,09	11,93
5,0	0,0788	0,0236	28,68	14,47
5,5	0,0682	0,0192	36,62	17,34
6,0	0,0594	0,0159	46,08	20,59
6,5	0,0522	0,0132	57,27	24,23
7,0	0,0461	0,0111	70,39	28,30
7,5	0,0410	0,0095	85,64	32,81
8,0	0,0366	0,0081	103,27	37,80
8,5	0,0328	0,0070	123,52	43,29
9,0	0,0296	0,0060	146,66	49,32
9,5	0,0268	0,0053	172,94	55,92
10,0	0,0243	0,0046	202,67	63,11

Задача 173. Поправка Амальди для нейтрального атома

В правую часть уравнения Пуассона, лежащего в основе модели Томаса — Ферми, правильнее было бы подставить не плотность заряда всех Z электронов, а плотность заряда, создаваемую $Z-1$ электроном. Это связано с тем, что с помощью указанного уравнения определяется эффективный потенциал, в поле которого движется один отдельно взятый электрон. Выяснить, к каким изменениям приводит указанная поправка к модели Томаса — Ферми в случае нейтрального атома.

Решение. Вместо уравнения (172.1) теперь имеем

$$\nabla^2 \Phi = 4\pi e \cdot \frac{Z-1}{Z} n(r), \quad (173.1)$$

где Φ означает потенциал, создаваемый ядром и $Z-1$ электроном и действующий на не включенный в правую часть уравнения (173.1) электрон номер Z . При таком упрощенном подходе безразлично, какой именно электрон мы рассматриваем в качестве пробного заряда, что, впрочем, вполне соответствует точности, свойственной статистической картине. Граничное условие при $r \rightarrow 0$ определяется зарядом ядра и, следовательно, остается прежним:

$$\Phi(r) = \frac{Ze}{r} \quad \text{при} \quad r \rightarrow 0, \quad (173.2)$$

на границе же нейтрального атома теперь должно быть

$$\Phi(R) = \frac{e}{R}, \quad \left(\frac{d\Phi}{dr} \right)_R = -\frac{e}{R^2}, \quad (173.3)$$

так как один положительный ядерный заряд e в данном случае остается незаэкранированным $Z-1$ электроном и продолжает действовать на электрон, рассматриваемый нами в качестве пробного.

Другое основное уравнение, следующее из квантовой статистики, имеет прежний вид, так что снова можно написать

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2 \hbar^3} \{2me [\Phi(r) - \Phi(R)]\}^{3/2}. \quad (173.4)$$

Исключая из уравнений (173.1) и (173.4) функцию $n(r)$ и вновь вводя безразмерную функцию

$$\varphi = \frac{r}{Ze} [\Phi(r) - \Phi(R)], \quad (173.5)$$

получаем прежнее универсальное дифференциальное уравнение

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = \frac{\varphi^{3/2}}{\sqrt{x}}, \quad (173.6)$$

в котором безразмерная независимая переменная определяется теперь соотношением $x = r/\tilde{a}$, причем

$$\tilde{a} = a \left(1 - \frac{1}{Z}\right)^{-2/3}, \quad (173.7)$$

и a — характерная длина, значение которой дается равенством (172.9).

Так как $\tilde{a} > a$, то на первый взгляд рассматриваемая поправка увеличивает размеры атома, хотя из физических соображений ясно, что эта поправка должна уменьшить отталкивание электронов, в результате они сильнее будут притягиваться ядром и размеры атома должны уменьшиться. На самом деле здесь нет никакого противоречия, поскольку теперь мы имеем дело с измененными граничными условиями. Для функции $\varphi(x)$ условия (173.3) записываются в виде

$$\varphi(X) = 0 \quad \text{и} \quad X\varphi'(X) = -\frac{1}{Z}. \quad (173.8)$$

Эти условия могут удовлетворяться лишь при конечных значениях радиуса атома, что с лихвой компенсирует эффект расплывания атома, связанный с величиной \tilde{a} .

Задача 174. Энергия атома в модели Томаса — Ферми

Пользуясь моделью Томаса — Ферми, вычислить полную энергию нейтрального атома. Кроме того, с помощью вариационной процедуры, минимизирующей полную энергию атома, вывести дифференциальное уравнение для плотности электронов $n(r)$, или соответствующее уравнение для электростатического потенциала $\Phi(r)$.

Решение. Полную энергию атома можно представить как сумму кинетической энергии электронов, потенциальной энергии взаимодействия электронов с ядром $E_{\text{потен}}^{(1)}$ и, наконец, потенциальной энергии взаимодействия электронов между собой $E_{\text{потен}}^{(2)}$.

Выражение для кинетической энергии можно написать, вспомнив основные результаты задачи 167. Если $n(r)$ — плотность электронов, то средняя кинетическая энергия электрона, нахо-

дящегося на расстоянии r от ядра, определяется выражением

$$\bar{E} = \frac{3}{5} \xi = \kappa n^{2/3}, \quad (174.1)$$

где

$$\kappa = \frac{3\hbar^2}{10m} (3\pi^2)^{2/3}.$$

Отсюда для суммарной кинетической энергии всех электронов находим

$$E_{\text{кин}} = \int n(r) \bar{E}(r) d\tau,$$

или

$$E_{\text{кин}} = \kappa \int n^{5/3} d\tau. \quad (174.2)$$

Выражения для $E_{\text{потен}}^{(1)}$ и $E_{\text{потен}}^{(2)}$ получаются непосредственно из соответствующих формул электростатики:

$$E_{\text{потен}}^{(1)} = -Ze^2 \int n(r) \frac{d\tau}{r} \quad (174.3)$$

и

$$E_{\text{потен}}^{(2)} = \frac{1}{2} e^2 \iint \frac{n(r) n(r')}{|r-r'|} d\tau d\tau'. \quad (174.4)$$

Таким образом, для полной энергии, т. е. для суммы выражений (174.2)—(174.4) можно написать

$$E = \int d\tau \left\{ \kappa n^{5/3} - \frac{Ze^2}{r} n + \frac{1}{2} e^2 n \int \frac{n(r')}{|r-r'|} d\tau' \right\} \equiv \int \eta d\tau. \quad (174.5)$$

Теперь с помощью подходящего выбора функции $n(r)$ мы должны минимизировать полную энергию, учитывая при этом уравнение связи

$$\int n(r) d\tau = Z, \quad (174.6)$$

означающее, что полное число электронов равно Z . Для решения поставленной вариационной проблемы необходимо рассмотреть уравнение

$$\delta \int (\eta + \lambda n) d\tau = 0, \quad (174.7)$$

где λ — неопределенный множитель Лагранжа. После подстановки выражения (174.5) в уравнение (174.7) находим

$$\int d\tau \delta n(r) \left\{ \frac{5}{3} \kappa n^{2/3} - \frac{Ze^2}{r} + e^2 \int \frac{n(r')}{|r-r'|} d\tau' + \lambda \right\} = 0. \quad (174.8)$$

Выше при написании последнего члена мы учли, что варьирование функций $n(r)$ и $n(r')$ в двойном интеграле дважды приводит

к одному и тому же результату. Энергия E будет экстремальна, если выражение, стоящее в фигурных скобках в (174.8), обращается в нуль.

Учитывая далее, что плотность электронов $n(r)$ зависит только от r и не зависит от угловых переменных, третий член в фигурных скобках с помощью разложения подынтегрального выражения по сферическим гармоникам можно представить в виде

$$\int \frac{n(r')}{|r-r'|} d\tau' = \frac{4\pi}{r} \int_0^r r'^2 n(r') dr' + 4\pi \int_r^\infty r' n(r') dr'.$$

Таким образом, в силу (174.8) имеем

$$\frac{5}{3} \kappa n^{2/3} - \frac{Ze^2}{r} + \frac{4\pi e^2}{r} \int_0^r r'^2 n(r') dr' + 4\pi e^2 \int_r^\infty r' n(r') dr' + \lambda = 0.$$

Чтобы исключить λ , продифференцируем полученное уравнение по r :

$$\frac{10}{9} \kappa n^{-1/3} \frac{dn}{dr} + \frac{Ze^2}{r^2} - \frac{4\pi e^2}{r^2} \int_0^r r'^2 n(r') dr' = 0.$$

(Вклады от дифференцирования интегралов по переменным пределам взаимно уничтожаются.) Умножая последнее уравнение на r^2 и снова дифференцируя по r , мы избавляемся от интегрального члена и получаем дифференциальное уравнение вида

$$\frac{10}{9} \kappa \frac{d}{dr} \left(r^2 n^{-1/3} \frac{dn}{dr} \right) = 4\pi e^2 r^2 n. \quad (174.9)$$

Для дальнейшего удобно перейти от плотности электронов $n(r)$ к электростатическому потенциалу $\Phi(r)$; согласно задаче 172, они связаны соотношением¹⁾

$$n = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2me\Phi}{\hbar^2} \right)^{3/2}. \quad (174.10)$$

Учитывая теперь, что потенциал Φ удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\nabla^2 \Phi = 4\pi en,$$

и вводя для краткости обозначение

$$C = \frac{8}{3\pi} \frac{me^2}{\hbar^3} \sqrt{2me}, \quad (174.11)$$

находим уравнение

$$\nabla^2 \Phi = C\Phi^{3/2}, \quad (174.12)$$

¹⁾ Для нейтрального атома $R = \infty$, а $\Phi(R) = 0$. — Прим. ред.

которое, если принять во внимание равенство

$$\nabla^2 \Phi = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\Phi),$$

совпадает с уравнением, выведенным в задаче 172 другим способом.

Соотношения (174.10) и (174.11) позволяют избавиться от дробных степеней функции n в формулах (174.2)—(174.4), где в зависимости от обстоятельств следует положить

$$\text{либо } n = \frac{1}{4\pi e} \nabla^2 \Phi, \quad \text{либо } n = \frac{C}{4\pi e} \Phi^{3/2}. \quad (174.13)$$

Таким образом, имеем

$$E_{\text{кин}} = \frac{3}{20\pi} \int \Phi \nabla^2 \Phi \, d\tau, \quad (174.14a)$$

$$E_{\text{потен}}^{(1)} = -\frac{Ze}{4\pi} \int \frac{\nabla^2 \Phi}{r} \, d\tau, \quad (174.14б)$$

$$E_{\text{потен}}^{(2)} = \frac{1}{32\pi^2} \iint \frac{\nabla^2 \Phi \nabla_1^2 \Phi}{|r-r_1|} \, d\tau \, d\tau_1. \quad (174.14в)$$

Эти интегралы можно значительно упростить, приняв во внимание сферическую симметрию и вводя вместо $\Phi(r)$ функцию

$$\varphi(r) = \frac{r}{Ze} \Phi(r) \quad (174.15)$$

Так как

$$\nabla^2 \Phi = \frac{Ze}{r} \varphi''(r),$$

то из формулы (174.14a) теперь следует

$$E_{\text{кин}} = \frac{3}{5} \int_0^\infty \frac{Ze}{r} \varphi \cdot \frac{Ze}{r} \varphi'' r^2 \, dr = \frac{3}{5} Z^2 e^2 \left\{ -(\varphi\varphi')_{r=0} - \int_0^\infty \varphi'^2 \, dr \right\}. \quad (174.16a)$$

Аналогично с помощью (174.14б) получаем

$$E_{\text{потен}}^{(1)} = -\frac{Ze}{4\pi} \int \frac{Ze}{r^2} \varphi'' \, d\tau = Z^2 e^2 \varphi'(0). \quad (174.16б)$$

Чтобы вычислить интеграл, входящий в формулу (174.14в), прежде всего заметим, что

$$\begin{aligned} I(r) &= \frac{1}{4\pi} \int \frac{\nabla_1^2 \Phi(r_1)}{|r-r_1|} \, d\tau_1 = \frac{1}{r} \int_0^r r_1^2 \nabla_1^2 \Phi(r_1) \, dr_1 + \int_r^\infty r_1 \nabla_1^2 \Phi(r_1) \, dr_1 = \\ &= \frac{Ze}{r} \int_0^r r_1 \varphi''(r_1) \, dr_1 + Ze \int_r^\infty \varphi''(r_1) \, dr_1 = \frac{Ze}{r} \{(\varphi - r\varphi')_{r=0} - \varphi(r)\}. \end{aligned}$$

Таким образом, вместо (174.14в) теперь имеем

$$E_{\text{потен}}^{(2)} = \frac{1}{8\pi} \int I(r) \nabla^2 \Phi d\tau = \frac{1}{2} Ze \int_0^\infty r^2 I(r) \frac{\Phi''}{r} dr =$$

$$= \frac{1}{2} Z^2 e^2 \left\{ \int_0^\infty \Phi'^2 dr + [r\Phi'^2]_{r=0} \right\}. \quad (174.16в)$$

Вместо переменной r удобно использовать безразмерную переменную x , определив ее соотношениями

$$x = \frac{r}{a}, \quad a = \left(\frac{9\pi^2}{128Z} \right)^{1/3} \frac{\hbar^2}{me^2} \quad (174.17)$$

(см. задачу 172). Так как при малых r , или, что то же самое, при малых x имеет место разложение

$$\Phi(x) = 1 - \mu x + \dots,$$

то в формулах (174.16а)–(174.16в) можно положить

$$-(\Phi\Phi')_{r=0} = \frac{\mu}{a}, \quad \left(\frac{d\Phi}{dr} \right)_{r=0} = -\frac{\mu}{a}, \quad \left[r \left(\frac{d\Phi}{dr} \right)^2 \right]_{r=0} = 0.$$

Отсюда окончательно получаем

$$E_{\text{кин}} = \frac{3}{5} \frac{Z^2 e^2}{a} (\mu - J),$$

$$E_{\text{потен}}^{(1)} = -\frac{Z^2 e^2}{a} \mu, \quad (174.18)$$

$$E_{\text{потен}}^{(2)} = \frac{1}{2} \frac{Z^2 e^2}{a} J,$$

где

$$J = \int_0^\infty \left(\frac{d\Phi}{dx} \right)^2 dx. \quad (174.19)$$

Выше и производная μ и интеграл J не зависят от Z , поскольку они определяются исключительно универсальной функцией $\Phi(x)$. Таблица значений функции $\Phi(x)$ приведена в задаче 172. С помощью этой таблицы находим

$$\mu = -\Phi'(0) = 1,588, \quad J = 0,454. \quad (174.20)$$

Отсюда для полной энергии атома, т. е. для суммы трех выражений (174.18), получаем

$$E = -\frac{Z^2 e^2}{a} \left(\frac{2}{5} \mu + \frac{1}{10} J \right) = -0,680 \frac{Z^2 e^2}{a}. \quad (174.21)$$

Так как $a \sim Z^{-1/3}$, то полная энергия пропорциональна $Z^{7/3}$:

$$E = -0,7687 Z^{7/3} \text{ ридберг} = -20,93 Z^{7/3} \text{ эВ}. \quad (174.22)$$

Задача 175. Теорема вириала для модели атома Томаса—Ферми

С помощью метода, развитого в задаче 151, доказать теорему вириала для модели атома Томаса—Ферми. В качестве следствия этой теоремы получить связь между величинами μ и J , определенными в предыдущей задаче [см. (174.20)], и выяснить, каков относительный вклад составных частей энергии атома в его полную энергию.

Решение. Пользуясь масштабным преобразованием, заменим функцию $n(r)$ набором функций

$$n_\lambda(r) = \lambda^3 n(\lambda r),$$

каждая из которых удовлетворяет условию нормировки

$$\int n_\lambda(r) d\tau = Z.$$

В результате отдельные части энергии электронов [выражения (174.2)—(174.4)] преобразуются к виду:

$$\begin{aligned} E_{\text{кин}}(\lambda) &= \lambda^2 E_{\text{кин}}, \\ E_{\text{потен}}^{(1)}(\lambda) &= \lambda E_{\text{потен}}^{(1)}, \\ E_{\text{потен}}^{(2)}(\lambda) &= \lambda E_{\text{потен}}^{(2)}. \end{aligned}$$

Таким образом, получаем

$$E(\lambda) = \lambda^2 E_{\text{кин}} + \lambda E_{\text{потен}}.$$

Так же как и в задаче 151, мы должны потребовать, чтобы $\partial E(\lambda)/\partial \lambda = 0$ при $\lambda = 1$. Из этого требования сразу же следует теорема вириала

$$2E_{\text{кин}} + E_{\text{потен}} = 0. \quad (175.1)$$

Подставляя в последнее равенство выражения (174.18), получаем

$$\mu = \frac{7}{2} J \quad (175.2)$$

в полном согласии с числовыми значениями (174.20). Различные части энергии электрона (174.18) теперь можно выразить через величину J . Мы имеем

$$E_{\text{кин}} = \frac{3}{2} U, \quad E_{\text{потен}}^{(1)} = -\frac{7}{2} U, \quad E_{\text{потен}}^{(2)} = \frac{1}{2} U, \quad (175.3)$$

где

$$U = \frac{Z^2 e^2}{a} J. \quad (175.4)$$

Отсюда для полной энергии атома получаем

$$E = -\frac{3}{2}U, \quad (175.5)$$

что опять-таки находится в согласии с числовым результатом, найденным в конце предыдущей задачи. Как и должно быть, сравнение выражений (175.5) и (175.3) вновь приводит к теореме вириала.

Задача 176. Приближение Гайтца для модели атома Томаса — Ферми

В случае нейтрального атома вместо универсальной функции Томаса — Ферми $\varphi_0(x)$ можно воспользоваться очень хорошим приближенным выражением

$$\tilde{\varphi}(x) = \frac{1}{(1 + \alpha x)^2}, \quad (176.1)$$

выбрав фигурирующий в нем параметр α надлежащим образом. Предполагая, что функция $\tilde{\varphi}$ удовлетворяет точному условию нормировки и что α не зависит от Z , найти числовое значение этого параметра, а также сравнить числовые значения функций $\tilde{\varphi}$ и φ_0 .

Решение. В задаче 172 было показано, что плотность электронов $n(r)$ и потенциал атома (в атомных единицах)

$$V(r) = -\frac{Z}{r} \varphi_0(r) \quad (176.2)$$

связаны соотношением

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2} (-2V)^{3/2}. \quad (176.3)$$

Отсюда следует, что условие нормировки

$$4\pi \int_0^{\infty} r^2 n(r) dr = Z \quad (176.4)$$

можно записать в виде

$$\frac{4}{3\pi} (2Z)^{3/2} \int_0^{\infty} r^{1/2} \varphi_0^{3/2}(x) dr = Z. \quad (176.5)$$

Это равенство является для функции $\varphi_0(x)$ точным, если

$$x = \frac{r}{a} \quad \text{и} \quad a = 0,88534Z^{-1/3}. \quad (176.6)$$

Теперь мы заменим функцию φ_0 приближенной функцией $\tilde{\varphi}$, определяемой выражением (176.1), но будем считать, что условие нормировки по-прежнему остается в силе. После замены переменных $y = \alpha x = (\alpha/a)r$ получаем

$$\frac{8\sqrt{Z}}{3\pi} V\bar{Z} \left(\frac{a}{\alpha}\right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{\sqrt{y} dy}{(1+y)^3} = 1. \quad (176.7)$$

Последний интеграл можно вычислить с помощью подстановки $u = y^2$. Действительно, нетрудно проверить, что

$$\int \frac{\sqrt{y} dy}{(1+y)^3} = 2 \int \frac{u^2 du}{(u^2+1)^3} = \frac{1}{4} \left[\frac{u(u^2-1)}{(u^2+1)^2} + \operatorname{arctg} u \right].$$

Подстановка пределов интегрирования $y=0$ и $y=\infty$ дает значение $\pi/8$, и в силу (176.7) получаем

$$\alpha = \left(\frac{2Z}{9}\right)^{1/3} a = 0,60570Z^{1/3}a. \quad (176.8)$$

Отсюда с учетом соотношения (176.6) находим

$$\alpha = 0,53625. \quad (176.9)$$

Используя полученное значение параметра α , можно сравнить числовые значения функций φ_0 и $\tilde{\varphi}$. Соответствующие данные приведены в нижеследующей таблице.

x	$\tilde{\varphi}$	φ_0	$\tilde{\varphi} - \varphi_0$
0	1	1	0
0,1	0,9008	0,8817	+0,0191
0,2	0,8156	0,7931	+0,0225
0,5	0,6219	0,6070	+0,0149
1,0	0,4237	0,4240	-0,0003
2,0	0,2328	0,2430	-0,0102
5,0	0,0738	0,0788	-0,0050
10,0	0,0247	0,0243	+0,0004

Замечание. В оригинальных работах Тейтца [Tietz T., Journ. Chem. Phys., 25, 787 (1956); Zs. Naturforsch., 23a, 191 (1968)] вместо нашего нормировочного множителя 0,60570 [равенство (176.8)] использован множитель 0,64309. Таким образом, приближение Тейтца не удовлетворяет точному условию нормировки. Однако в его приближении разности $\tilde{\varphi} - \varphi_0$ в наиболее существенной области $0 < x < 0,5$ несколько меньше наших, хотя при $x > 1$ наше приближение лучше.

Задача 177. Вариационный метод для модели атома Томаса — Ферми

В вариационной задаче, эквивалентной дифференциальному уравнению Томаса—Ферми, использовать в качестве пробных функций функции Тейтца

$$\tilde{\varphi}(x) = \frac{1}{(1+\alpha x)^2}, \quad (177.1)$$

считая α параметром Ритца.

Решение. Дифференциальное уравнение

$$\varphi'' = x^{-1/2} \varphi^{3/2} \quad (177.2)$$

эквивалентно вариационной задаче об экстремуме интеграла

$$J = \int_0^{\infty} \left(\frac{1}{2} \varphi'^2 + \frac{2}{5} x^{-1/2} \varphi^{5/2} \right) dx \quad (177.3)$$

при фиксированных граничных условиях $\varphi(0) = 1$ и $\varphi(\infty) = 0$. Подставляя удовлетворяющую граничным условиям пробную функцию (177.1) в интеграл (177.3), получаем

$$J = \int_0^{\infty} \left\{ \frac{2\alpha^2}{(1+\alpha x)^6} + \frac{2}{5} x^{-1/2} \frac{1}{(1+\alpha x)^5} \right\} dx.$$

Для вычисления этого интеграла положим во втором слагаемом $\alpha x = t^2$ и воспользуемся формулой

$$\int \frac{dt}{(1+t^2)^5} = \frac{1}{8} \left\{ \frac{t}{(1+t^2)^4} + \frac{7}{6} \frac{t}{(1+t^2)^3} + \frac{35}{24} \frac{t}{(1+t^2)^2} + \frac{35}{16} \frac{t}{1+t^2} + \frac{35}{16} \operatorname{arctg} t \right\},$$

справедливость которой нетрудно проверить. В результате находим

$$J = \frac{2}{5} \left(\alpha + \frac{35}{128} \alpha^{-1/2} \right). \quad (177.4)$$

Таким образом, условие экстремума $dJ/d\alpha = 0$ дает

$$\alpha = \left(\frac{35}{256} \right)^{2/3} = 0,570. \quad (177.5)$$

Это значение α лишь слегка отличается от значения $\alpha = 0,536$, которое, как было показано в предыдущей задаче, удовлетворяет

точному условию нормировки

$$\int_0^{\infty} \sqrt{x} \varphi^{3/2} dx = 1. \quad (177.6)$$

В нашем же случае значение интеграла равно

$$\alpha^{-3/2} \cdot \frac{\pi}{8} \approx \frac{32}{35},$$

т. е. приближенная функция, минимизирующая значение интеграла J , соответствует наличию в атоме ${}^{32}_{35}Z$ электронов.

Задача 178. Влияние экранировки на K -электроны

Найти поправку к энергии связи K -электрона, обусловленную экранировкой. При расчетах использовать приближение Тайтца для модели атома Томаса—Ферми.

Решение. Предположим, что из атома с зарядом ядра Z удалены единичный ядерный заряд и один из двух K -электронов. В результате такой операции у нас получился бы нейтральный атом с зарядом ядра $Z-1$. Если теперь вернуть ядру удаленный ранее положительный заряд, но пренебречь его влиянием на движение оставшихся $Z-1$ электронов, то полученная таким образом система зарядов будет создавать в пространстве электростатический потенциал, описываемый формулой (ниже используются атомные единицы)

$$\Phi(r) = \frac{1}{r} + \frac{Z-1}{r} \varphi(x), \quad (178.1)$$

где $\varphi(x)$ — функция Томаса—Ферми от переменной

$$x = \frac{r}{a}, \quad a = 0,88534 (Z-1)^{-1/3}. \quad (178.2)$$

Если теперь добавить к этой системе ранее удаленный K -электрон (заряд -1), то его потенциальная энергия будет равна

$$V(r) = -\Phi(r). \quad (178.3)$$

Для дальнейших расчетов воспользуемся теорией возмущений. Без учета экранировки выражение для потенциальной энергии K -электрона имело бы вид

$$V_0(r) = -\frac{Z}{r}.$$

Таким образом, с учетом экранировки имеем

$$V(r) = -\frac{1}{r} - \frac{Z-1}{r} \varphi(x) = V_0(r) + \frac{Z-1}{r} [1 - \varphi(x)]. \quad (178.4)$$

В пренебрежении экранировкой энергия E_0 и соответствующая ей волновая функция $u_0(r)$ K -электрона определяются выражениями

$$E_0 = -\frac{1}{2} Z^2, \quad u_0 = \frac{Z^{3/2}}{\sqrt{\pi}} e^{-Zr}. \quad (178.5)$$

Благодаря экранировке энергетический уровень в первом порядке теории возмущений сдвигается на величину

$$\Delta E_s = \int u_0^* \frac{Z-1}{r} (1 - \varphi) u_0 dr.$$

Последнее выражение после подстановки в него функции u_0 принимает вид

$$\Delta E_s = 4Z^3 (Z-1) \int_0^\infty r e^{-2Zr} [1 - \varphi(x)] dr. \quad (178.6)$$

Теперь уже можно воспользоваться приближением Тейтца (см. задачу 176):

$$\varphi(x) = \frac{1}{(1 + \alpha x)^2}, \quad \alpha = 0,53625. \quad (178.7)$$

Чтобы вычислить интеграл (178.6), перейдем к новой переменной

$$t = \beta (1 + \alpha x), \quad (178.8)$$

где

$$\beta = 2Z \frac{\alpha}{a} = 3,302Z (Z-1)^{-1/2}. \quad (178.9)$$

В результате получаем

$$\Delta E_s = Z (Z-1) e^\beta \int_\beta^\infty e^{-t} \left(t - \beta - \frac{\beta^2}{t} + \frac{\beta^3}{t^2} \right) dt. \quad (178.10)$$

Фигурирующий здесь интеграл

$$E_1(\beta) = \int_\beta^\infty e^{-t} \frac{dt}{t} \quad (178.11)$$

представляет собой хорошо известную функцию, асимптотическое поведение которой при больших значениях β описывается рядом

$$E_1(\beta) = \frac{e^{-\beta}}{\beta} \left(1 - \frac{1!}{\beta} + \frac{2!}{\beta^2} - \frac{3!}{\beta^3} \pm \dots \right). \quad (178.12)$$

Что же касается интеграла от последнего члена в формуле (178.10), то он также выражается через $E_1(\beta)$:

$$E_2(\beta) = \int_{\beta}^{\infty} e^{-t} \frac{dt}{t^2} = \frac{e^{-\beta}}{\beta} - E_1(\beta). \quad (178.13)$$

Таким образом, находим

$$\Delta E_s = Z(Z-1) [1 + \beta^2 - \beta^2(1 + \beta) e^{\beta} E_1(\beta)]. \quad (178.14)$$

Отсюда при $\beta \gg 1$ с учетом разложения (178.12) окончательно получаем

$$\Delta E_s = Z(Z-1) \frac{4}{\beta} \left(1 - \frac{9/2}{\beta} + \frac{24}{\beta^2} - \frac{150}{\beta^3} \pm \dots \right). \quad (178.15)$$

Переходя к числовым оценкам величины сдвига энергетического уровня ΔE_s , прежде всего заметим, что параметр β , определяемый формулой (178.9), действительно велик (см. также приведенную ниже таблицу), поэтому приближение (178.15) является вполне разумным. В третьем столбце таблицы даны значения выражения, стоящего в круглых скобках в формуле (178.15) (начальные члены этого ряда быстро убывают). При изменении Z от 20 до 80 сдвиг энергетического уровня ΔE_s составляет 26—12% от величины $|E_0|$. Следовательно, он действительно представляет собой всего лишь поправку, хотя и не настолько малую, чтобы учет второго порядка теории возмущений не мог изменить ее на несколько процентов. Надо, однако, иметь в виду, что уже сама по себе используемая модель Томаса—Ферми слишком груба, поэтому учет второго порядка теории возмущений физически нецелесообразен.

В рентгеноспектроскопии обычно принято характеризовать сдвиг энергетического уровня с помощью экранировочной постоянной s , определяемой равенством

$$E = -\frac{1}{2} Z^2 + \Delta E_s = -\frac{1}{2} (Z-s)^2. \quad (178.16)$$

Из этого определения следует

$$s = Z \left(1 - \sqrt{1 - \frac{\Delta E_s}{|E_0|}} \right). \quad (178.17)$$

Значения экранировочной постоянной, рассчитанные по этой формуле, также приведены в нашей таблице. Так как

$$\Delta E_s \ll \frac{1}{4} |E_0|,$$

то для грубой оценки квадратный корень можно заменить степенным разложением, и мы получаем

$$s \approx Z \frac{\Delta E_s}{2|E_0|} = \frac{\Delta E_s}{Z}.$$

Таким образом, экранировочная постоянная примерно пропорциональна $Z^{1/2}$. Если для оценок воспользоваться грубой формулой вида

$$s = \sigma Z^{1/2},$$

то с ее помощью нетрудно получить следующие пары значений:

$$\begin{array}{l} Z = 20 \quad 50 \quad 80 \\ \sigma = 1,03 \quad 1,12 \quad 1,15. \end{array}$$

Однако определять коэффициент пропорциональности σ с такой большой точностью не имеет смысла. Сравнение экспериментальных значений экранировочной постоянной s с ее теоретическими значениями показывает, что вплоть до $Z=50$ согласие между теорией и экспериментом довольно хорошее, но по мере дальнейшего роста Z согласие между ними нарушается. Вместо предсказываемого теорией медленного увеличения s фактические значения экранировочной постоянной, достигнув максимума 3,7, начинают сначала медленно, а после $Z=70$ быстро убывать. Вполне очевидно, что отмеченное противоречие между теорией и экспериментом при больших значениях Z следует приписать релятивистским эффектам. Такое заключение качественно подтверждается данными, приведенными в двух последних столбцах нашей таблицы.

Z	β	$(1 - \dots)$	ΔE_s	$ E_0 $	s	ΔE_r	s'
20	24,75	0,847	52,2	200	2,81		
30	32,25	0,880	95,2	450	3,36		
40	38,96	0,897	144,3	800	3,79	-17,1	3,35
50	45,12	0,910	198,0	1250	4,13	-41,7	3,26
60	50,90	0,921	257,3	1800	4,42	-86,3	2,94
70	56,35	0,927	318,6	2450	4,71	-160	2,34
80	61,56	0,932	384,0	3200	4,96	-273	1,62

Согласно релятивистской квантовой механике (см. задачу 203), невозмущенная энергия K -электрона понижается на величину

$$\Delta E_r = -\frac{1}{8} Z^2 \left(\frac{Z}{137} \right)^2.$$

Этот сдвиг уровня надо добавить к сдвигу ΔE_s , обусловленному экранировкой, и лишь затем вычислять экранировочную постоянную. Результаты таких расчетов приведены в последнем столбце нашей таблицы. Так как суммарный сдвиг

$$\Delta E = \Delta E_s + \Delta E_r$$

по мере роста Z делается все меньше и меньше по сравнению с первоначальным сдвигом ΔE_s , то исправленное значение экранировочной постоянной s , характеризующее отклонение эффективного поля от неэкранированного поля ядра, также убывает все быстрее с ростом Z , что согласуется с данными эксперимента. Строго говоря, релятивистские эффекты следовало бы учесть не только при вычислении энергии E_0 , но и при вычислении сдвига ΔE_s . В этой связи наши результаты нужно рассматривать как сравнительно грубое приближение, однако допускаемая нами ошибка вряд ли выходит за рамки точности модели Томаса—Ферми, не учитывающей эффектов, обусловленных оболочечной структурой атома.

V. Нестационарные задачи

Задача 179. Двухуровневая система под действием не зависящего от времени возмущения

Система обладает только двумя стационарными состояниями $|1\rangle$ и $|2\rangle$ с энергиями $\hbar\omega_1$ и $\hbar\omega_2$ ($\hbar\omega_1 < \hbar\omega_2$). В момент времени $t=0$, когда система находилась в основном состоянии, было включено не зависящее от времени возмущение W . Вычислить вероятность обнаружения системы в том или ином из ее возможных состояний в момент времени t .

Решение. Пусть H означает гамильтониан невозмущенной системы, так что два ее возможных стационарных состояния описываются уравнениями

$$H|1\rangle = \hbar\omega_1|1\rangle; \quad H|2\rangle = \hbar\omega_2|2\rangle. \quad (179.1)$$

Тогда решение уравнения Шредингера при наличии возмущения

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt} |\psi\rangle = (H + W) |\psi\rangle \quad (179.2)$$

можно выразить через стационарные состояния:

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t) e^{-i\omega_1 t} |1\rangle + c_2(t) e^{-i\omega_2 t} |2\rangle. \quad (179.3)$$

Эта возможность обусловлена тем, что состояния $|1\rangle$ и $|2\rangle$ образуют полный ортонормированный набор состояний и соотношение (179.3) представляет собой просто-напросто разложение состояния $|\psi\rangle$ по указанному полному набору, причем коэффициенты разложения являются функциями времени и должны определяться из начальных условий

$$c_1(0) = 1, \quad c_2(0) = 0. \quad (179.4)$$

Если выражение (179.3) подставить в уравнение (179.2) и умножить ¹⁾ это уравнение почленно на $\langle 1|$ или на $\langle 2|$, то в результате для определения коэффициентов мы найдем два диф-

¹⁾ Здесь имеется в виду скалярное умножение совектора на вектор в гильбертовом пространстве состояний.

ференциальных уравнения первого порядка:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \dot{c}_1 e^{-i\omega_1 t} &= \langle 1 | W | 1 \rangle c_1 e^{-i\omega_1 t} + \langle 1 | W | 2 \rangle c_2 e^{-i\omega_2 t}, \\ -\frac{\hbar}{i} \dot{c}_2 e^{-i\omega_2 t} &= \langle 2 | W | 1 \rangle c_1 e^{-i\omega_1 t} + \langle 2 | W | 2 \rangle c_2 e^{-i\omega_2 t}. \end{aligned} \quad (179.5)$$

Пусть для краткости

$$\langle \mu | W | \nu \rangle = W_{\mu\nu},$$

тогда в силу эрмитовости оператора W диагональные матричные элементы W_{11} и W_{22} будут действительными, а недиагональные матричные элементы будут связаны соотношением

$$W_{12} = W_{21}^*.$$

Пользуясь обозначением

$$\omega_0 = \omega_2 - \omega_1 \quad (179.6)$$

($\hbar\omega_0$ есть, очевидно, разность энергий двух рассматриваемых состояний), уравнения (179.5) можно переписать следующим образом:

$$\begin{aligned} \hbar i \dot{c}_1 &= W_{11} c_1 + W_{21} e^{-i\omega_0 t} c_2, \\ \hbar i \dot{c}_2 &= W_{12} e^{i\omega_0 t} c_1 + W_{22} c_2. \end{aligned} \quad (179.7)$$

Решение этой системы ищем в виде

$$c_1 = A e^{-i\omega t}, \quad c_2 = B e^{-i(\omega - \omega_0) t}. \quad (179.8)$$

После подстановки выражений (179.8) в систему уравнений (179.7) получаем

$$\begin{aligned} (W_{11} - \hbar\omega) A + W_{21} B &= 0, \\ W_{12} A + (W_{22} - \hbar\omega + \hbar\omega_0) B &= 0. \end{aligned}$$

Определитель этой системы линейных алгебраических уравнений обращается в нуль при двух значениях частоты ω :

$$\omega_{I, II} = \frac{W_{11}}{\hbar} + \frac{1}{2} \gamma \pm \sigma, \quad (179.9)$$

где

$$\begin{aligned} \hbar\gamma &= W_{22} - W_{11} + \hbar\omega_0, \\ \hbar\sigma &= \sqrt{\frac{1}{4} \gamma^2 + |W_{12}|^2}. \end{aligned} \quad (179.10)$$

Далее имеем

$$B_{I, II} = \frac{\hbar\omega_{I, II} - W_{11}}{W_{21}} A_{I, II} \quad (179.11)$$

и, следовательно,

$$c_1(t) = A_I e^{-i\omega_I t} + A_{II} e^{-i\omega_{II} t},$$

$$c_2(t) = \frac{1}{W_{21}} e^{i\omega_0 t} \{ (\hbar\omega_I - W_{11}) A_I e^{-i\omega_I t} + (\hbar\omega_{II} - W_{11}) A_{II} e^{-i\omega_{II} t} \}.$$

Постоянные A_I и A_{II} можно исключить, воспользовавшись начальными условиями (179.4). Несложные вычисления приводят к следующему результату:

$$c_1(t) = \exp \left[-i \left(\frac{W_{11}}{\hbar} + \frac{1}{2} \gamma \right) t \right] \left(\cos \sigma t + i \frac{\gamma}{2\sigma} \sin \sigma t \right), \quad (179.12a)$$

$$c_2(t) = -i \frac{W_{12}}{\hbar\sigma} \exp \left[-i \left(\frac{W_{11}}{\hbar} + \frac{1}{2} \gamma - \omega_0 \right) t \right] \sin \sigma t. \quad (179.12b)$$

Отсюда для вероятности обнаружить систему в возбужденном состоянии получаем

$$|c_2(t)|^2 = \frac{|W_{12}|^2}{\hbar^2 \sigma^2} \sin^2 \sigma t.$$

Последнее выражение с учетом (179.10) принимает вид

$$|c_2(t)|^2 = \frac{4|W_{12}|^2}{(\hbar\gamma)^2 + 4|W_{12}|^2} \sin^2 \sigma t. \quad (179.13)$$

Вероятность обнаружить систему в исходном основном состоянии определяется выражением

$$|c_1(t)|^2 = \cos^2 \sigma t + \left(\frac{\gamma}{2\sigma} \right)^2 \sin^2 \sigma t,$$

или

$$|c_1(t)|^2 = 1 - \frac{4|W_{12}|^2}{(\hbar\gamma)^2 + 4|W_{12}|^2} \sin^2 \sigma t. \quad (179.14)$$

Заметим, что сумма выражений (179.13) и (179.14) равна единице. Таким образом, рассматриваемая система осциллирует между двумя стационарными состояниями с периодом π/σ .

Задача 180. Действие периодического возмущения на двухуровневую систему

Имеется та же самая двухуровневая система, что и в предыдущей задаче. В момент времени $t=0$ включается *периодическое* возмущение $W \cos \omega t$ (например, световая волна), частота которого *почти* совпадает с частотой $\omega_0 = \omega_2 - \omega_1$, соответствующей разности энергий двух рассматриваемых уровней. Определить вероятность обнаружения системы в том или ином из ее возможных состояний в момент времени t после включения периодического возмущения.

Решение. Решение уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt} |\psi\rangle = [H + W \cos \omega t] |\psi\rangle \quad (180.1)$$

ищем в виде

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t) e^{-i\omega_1 t} |1\rangle + c_2(t) e^{-i\omega_2 t} |2\rangle, \quad (180.2)$$

где коэффициенты разложения должны определяться из начального условия

$$|\psi(0)\rangle = |1\rangle, \text{ или } c_1(0) = 1, c_2(0) = 0. \quad (180.3)$$

Выше $|1\rangle$ и $|2\rangle$ — решения уравнения Шредингера для стационарных состояний:

$$H|1\rangle = \hbar\omega_1|1\rangle, \quad H|2\rangle = \hbar\omega_2|2\rangle, \quad (180.4)$$

причем указанные стационарные решения можно считать ортонормированными. Подставляя выражение (180.2) в уравнение (180.1) и умножая затем это уравнение на $\langle 1|$ или $\langle 2|$, получаем два дифференциальных уравнения для определения величин $c_1(t)$ и $c_2(t)$:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \dot{c}_1 e^{-i\omega_1 t} &= \cos \omega t \{ \langle 1|W|1\rangle c_1 e^{-i\omega_1 t} + \langle 1|W|2\rangle c_2 e^{-i\omega_2 t} \}, \\ -\frac{\hbar}{i} \dot{c}_2 e^{-i\omega_2 t} &= \cos \omega t \{ \langle 2|W|1\rangle c_1 e^{-i\omega_1 t} + \langle 2|W|2\rangle c_2 e^{-i\omega_2 t} \}. \end{aligned} \quad (180.5)$$

Введем обозначение

$$\omega_0 = \omega_2 - \omega_1$$

и, кроме того, положим

$$\omega - \omega_0 = \Delta\omega. \quad (180.6)$$

Ниже будем считать, что

$$|\Delta\omega| \ll \omega_0. \quad (180.7)$$

Система уравнений (180.5) теперь принимает вид

$$\begin{aligned} i\dot{c}_1 &= \frac{1}{2\hbar} \{ \langle 1|W|1\rangle (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) c_1 + \langle 1|W|2\rangle (e^{i\Delta\omega t} + e^{-i(\omega+\omega_0)t}) c_2 \}, \\ i\dot{c}_2 &= \frac{1}{2\hbar} \{ \langle 2|W|1\rangle (e^{i(\omega+\omega_0)t} + e^{-i\Delta\omega t}) c_1 + \langle 2|W|2\rangle (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) c_2 \}. \end{aligned}$$

При такой записи отчетливо выявляется наличие членов двух типов: высокочастотных — с частотами порядка ω и 2ω и низкочастотных — с частотой $\Delta\omega$. Усреднение по временному интервалу $2\pi/\omega$ позволяет избавиться от высокочастотных членов,

поэтому, заменив коэффициенты c_1 и c_2 усредненными величинами

$$C_\mu(t) = \frac{1}{2\tau} \int_{t-\tau}^{t+\tau} c_\mu(t') dt',$$

где

$$\tau = \frac{\pi}{\omega},$$

получим для этих усредненных величин значительно более простую систему уравнений, если при усреднении будем считать медленно меняющиеся множители $\exp(\pm i\Delta\omega t)$ постоянными:

$$\begin{aligned} i\dot{C}_1 &= \frac{1}{2\hbar} \langle 1 | W | 2 \rangle e^{i\Delta\omega t} C_2, \\ i\dot{C}_2 &= \frac{1}{2\hbar} \langle 2 | W | 1 \rangle e^{-i\Delta\omega t} C_1. \end{aligned} \quad (180.8)$$

Система дифференциальных уравнений (180.8) допускает точное решение. Действительно, дифференцируя почленно одно из них и исключая с помощью другого уравнения одну из искомым функций, получаем

$$\begin{aligned} \ddot{C}_1 - i\Delta\omega\dot{C}_1 + \frac{1}{4}\Omega^2 C_1 &= 0, \\ \ddot{C}_2 + i\Delta\omega\dot{C}_2 + \frac{1}{4}\Omega^2 C_2 &= 0, \end{aligned} \quad (180.9)$$

где

$$\Omega^2 = \frac{1}{\hbar^2} \langle 1 | W | 2 \rangle \langle 2 | W | 1 \rangle = \frac{1}{\hbar^2} |\langle 2 | W | 1 \rangle|^2. \quad (180.10)$$

Если теперь ввести обозначение

$$R = \sqrt{\Omega^2 + (\Delta\omega)^2}, \quad (180.11)$$

то решение последней системы, удовлетворяющее начальным условиям (180.3), можно записать в виде

$$\begin{aligned} C_1 &= e^{i\frac{\Delta\omega}{2}t} \left(\cos \frac{Rt}{2} + A \sin \frac{Rt}{2} \right), \\ C_2 &= e^{-i\frac{\Delta\omega}{2}t} B \sin \frac{Rt}{2}. \end{aligned} \quad (180.12)$$

Фигурирующие здесь постоянные интегрирования A и B можно вычислить, подставив выражения (180.12) в систему уравнений первого порядка (180.8). Указанная подстановка дает

$$A = -i\frac{\Delta\omega}{R}, \quad B = -i\frac{\langle 2 | W | 1 \rangle}{\hbar R}. \quad (180.13)$$

Для вероятности обнаружить систему в возбужденном состоянии в момент времени t получаем

$$|C_2|^2 = \frac{\Omega}{\Omega^2 + (\Delta\omega)^2} \sin^2 \frac{Rt}{2}. \quad (180.14)$$

Вероятность же обнаружить систему по-прежнему в основном состоянии имеет вид

$$|C_1|^2 = \cos^2 \frac{Rt}{2} + \frac{(\Delta\omega)^2}{\Omega^2 + (\Delta\omega)^2} \sin^2 \frac{Rt}{2}. \quad (180.15)$$

Согласно формуле (180.14), переход системы в возбужденное состояние представляет собой типичный резонансный процесс: вероятность возбуждения быстро падает по мере роста величины $|\Delta\omega|$. Необходимо подчеркнуть, что наше рассмотрение правомерно лишь до тех пор, пока выполняется условие (180.7). Процесс возбуждения системы периодически повторяется с частотой R , определяемой выражением (180.11), которое в основном зависит от величины матричного элемента. Спустя время

$$t_n = \frac{2\pi n}{R}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (180.16)$$

система вновь будет обнаружена в основном состоянии. Таким образом, если периодическое возмущение, например световая волна, включается в момент времени $t = 0$, а затем выключается в момент времени $t = t_n$, то в результате мы не обнаружим никаких изменений в состоянии системы.

Приложение. Пусть гамильтониан H описывает взаимодействие s -электрона с магнитным полем \mathcal{H}_0 , направленным вдоль оси z . В этом случае величина $\hbar(\omega_2 - \omega_1)$ равна расстоянию между уровнями, отвечающими противоположным ориентациям спина. Если состояние $|2\rangle$ соответствует верхнему уровню, а состояние $|1\rangle$ — нижнему, то $\omega_0 = 2\mu\mathcal{H}_0/\hbar$. Пусть теперь возмущением служит переменное магнитное поле, $\mathcal{H}' \cos \omega t$, так что

$$W = -\mu(\sigma \cdot \mathcal{H}') \cos \omega t, \quad \mu = -\frac{e\hbar}{2mc}.$$

Если поле \mathcal{H}' параллельно полю \mathcal{H}_0 , то матричный элемент $\langle 1 | W | 2 \rangle$ обращается в нуль. В этом случае каждое из состояний $|1\rangle$ и $|2\rangle$ независимо подвергается действию возмущения, но переходы между ними отсутствуют. Если же поле \mathcal{H}' перпендикулярно полю \mathcal{H}_0 (можно, например, считать, что оно направлено вдоль оси x), то диагональные матричные элементы оператора W обращаются в нуль и мы приходим в точности к той самой задаче, которая была разобрана нами выше, причем в данном случае

$$\langle 1 | W | 2 \rangle = \langle 2 | W | 1 \rangle = -\mu\mathcal{H}'.$$

Согласно полученным ранее результатам, если $\omega \approx \omega_0$, такая система будет вести себя резонансным образом, попеременно переходя из одного магнитного состояния в другое. Рассмотренный пример представляет собой простейший случай *парамагнитного резонанса*.

Задача 181. Теория возмущений Дирака

Пусть у атомной системы имеются невырожденные стационарные состояния $|\psi_k\rangle$. В момент времени $t=0$ система находится в основном состоянии $|\psi_0\rangle$; с этого момента на нее начинают действовать возмущение (зависящее или не зависящее от времени), которое вызывает переходы в другие состояния $|\psi_l\rangle$. В момент времени t возмущение выключается. Считая возмущение малым, найти вероятность обнаружения системы в состоянии $|\psi_l\rangle$.

Решение. Пусть состояния невозмущенной системы удовлетворяют уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt} |\psi_k\rangle = H |\psi_k\rangle, \quad (181.1)$$

где

$$|\psi_k\rangle = |k\rangle e^{-i\omega_k t}, \quad E_k = \hbar\omega_k,$$

и пусть, кроме того,

$$\langle l | k \rangle = \delta_{kl}. \quad (181.2)$$

После включения возмущения W состояние системы будет описываться уравнением

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dt} |\psi\rangle = (H + W) |\psi\rangle. \quad (181.3)$$

Состояние $|\psi\rangle$ можно разложить в ряд

$$|\psi\rangle = \sum_k a_k(t) |\psi_k\rangle. \quad (181.4)$$

В силу соотношений (181.2) из формулы (181.4) следует¹⁾

$$\sum_k |a_k(t)|^2 = 1. \quad (181.5)$$

Величина $|a_k|^2$ представляет собой вероятность обнаружить систему в состоянии $|\psi_k\rangle$ в момент времени t .

Подставляя сумму (181.4) в дифференциальное уравнение (181.3), получаем

$$-\frac{\hbar}{i} \sum_k (\dot{a}_k - i\omega_k a_k) |\psi_k\rangle = \sum_k (\hbar\omega_k + W) a_k |\psi_k\rangle.$$

Умножая последнее равенство почленно на $\langle l |$ и учитывая затем

¹⁾ Если наряду с дискретным имеется непрерывный спектр, то последний путем введения куба периодичности формально можно преобразовать в дискретный спектр и включить его, таким образом, без дальнейших осложнений в суммы (181.4) и (181.5).

соотношения (181.2), находим

$$\dot{a}_l = -\frac{i}{\hbar} \sum_k e^{-i(\omega_k - \omega_l)t} \langle l | W | k \rangle a_k. \quad (181.6)$$

До сих пор мы не прибегали ни к каким приближениям, и последнее уравнение является точным. Оно отражает тот факт, что скорость перехода в состояние $|l\rangle$ зависит от *всех* состояний системы, которые при действии данного возмущения комбинируют с состоянием $|l\rangle$. Разумеется, этот же вывод следует и из соотношения (181.5). Действительно, если один из коэффициентов, скажем a_l , изменился, то должны измениться и другие коэффициенты, так чтобы сумма (181.5) оставалась постоянной. (См. также задачу 179, где рассмотрен случай системы с двумя возможными состояниями.)

Если возмущение *мало*, то для получения первого приближения мы можем подставить в правую часть уравнения (181.6) начальные значения

$$a_k(0) = \delta_{k0}. \quad (181.7)$$

В случае $l \neq 0$ вместо (181.6) получаем

$$\dot{a}_l = -\frac{i}{\hbar} e^{-i(\omega_0 - \omega_l)t} \langle l | W | 0 \rangle. \quad (181.8)$$

Заметим, что по сравнению с задачей 179 наше рассмотрение имеет теперь значительно менее общий характер, так как мы пренебрегаем обратными переходами из состояния $|l\rangle$ в состояние $|0\rangle$. Интегрирование уравнения (181.8) дает

$$a_l(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle l | W | 0 \rangle e^{-i(\omega_0 - \omega_l)t'} dt'. \quad (181.9)$$

Величина этого интеграла в значительной мере определяется тем, как именно возмущение W , а следовательно, и его матричные элементы зависят от времени.

Наше приближение правомерно лишь до тех пор, пока

$$\frac{|\langle l | W | 0 \rangle| t}{\hbar} \ll 1, \quad (181.10)$$

так что все коэффициенты $a_l(t)$ все время остаются малыми. Надо заметить, что в силу неравенства (181.10)

$$(\omega_l - \omega_0)t \ll \frac{\hbar(\omega_l - \omega_0)}{|\langle l | W | 0 \rangle|}.$$

Так как стоящая в числителе энергия возбуждения обычно значительно больше матричного элемента, стоящего в знаменателе,

то показатель экспоненциальной функции, фигурирующей в формулах (181.8) или (181.9), может оказаться довольно большой величиной, поэтому коэффициент $a_l(t)$ будет в этом случае осциллирующей функцией времени, что не вполне согласуется с основной идеей, лежащей в основе используемой нами теории возмущений. В нижеследующей задаче показано, каким образом можно избавиться от этой трудности.

Задача 182. Периодическое возмущение и резонанс

Пусть атомная система, рассмотренная в предыдущей задаче, подвергается действию периодического возмущения

$$W(t) = \mathcal{W} e^{-i\omega t} + \mathcal{W}^\dagger e^{i\omega t}. \quad (182.1)$$

Обсудить вопрос о резонансном поглощении и выяснить, каким образом влияет на вероятность переходов конечная ширина спектральной линии возмущающего поля.

Решение. Подставив выражение (182.1) в общую формулу первого порядка теории возмущений (181.9) и выполнив интегрирование, получим

$$a_l(t) = -\frac{i}{\hbar} \left\{ \langle l | \mathcal{W} | 0 \rangle \frac{e^{i(\omega_l - \omega_0 - \omega)t} - 1}{i(\omega_l - \omega_0 - \omega)} + \langle l | \mathcal{W}^\dagger | 0 \rangle \frac{e^{i(\omega_l - \omega_0 + \omega)t} - 1}{i(\omega_l - \omega_0 + \omega)} \right\}. \quad (182.2)$$

Энергия возбуждения, $E_{\text{возб}} = \hbar(\omega_l - \omega_0)$, является положительной величиной, поэтому при резонансе, когда $\hbar\omega = E_{\text{возб}}$, первый член в выражении (182.2) значительно больше второго члена. Таким образом, если выполнено условие частот Бора

$$\omega = \omega_l - \omega_0, \quad (182.3)$$

то система забирает энергию от приложенного к ней переменного поля и мы имеем

$$|a_l(t)|^2 = \frac{4|\langle l | \mathcal{W} | 0 \rangle|^2}{\hbar^2} \cdot \frac{\sin^2 \frac{1}{2}(\omega_l - \omega_0 - \omega)t}{(\omega_l - \omega_0 - \omega)^2}. \quad (182.4)$$

Эта формула остается справедливой и в том случае, когда спектральная линия возмущающего поля имеет конечную ширину. Если интенсивность возмущающего поля в интервале частот между ω и $\omega + d\omega$ характеризуется выражением $\rho(\omega) d\omega$, то можно написать

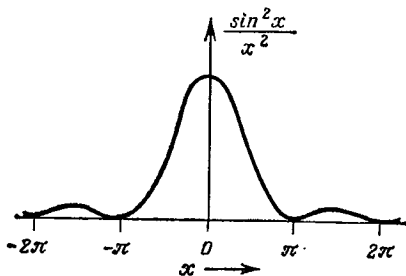
$$|a_l(t)|^2 = \int \rho(\omega) \cdot 4|\langle l | \mathcal{W} | 0 \rangle|^2 \frac{\sin^2 \frac{1}{2}(\omega_l - \omega_0 - \omega)t}{\hbar^2(\omega_l - \omega_0 - \omega)^2} d\omega. \quad (182.5)$$

Вводя сюда новую переменную интегрирования

$$x = \frac{1}{2} [\omega - (\omega_l - \omega_0)] t,$$

получаем

$$|a_l(t)|^2 = 2t \int \rho(\omega_l - \omega_0 + 2x/t) \left| \langle l | \frac{\mathscr{H}}{\hbar} | 0 \rangle \right|^2 \cdot \frac{\sin^2 x}{x^2} dx.$$



Фиг. 70. Функция $\sin^2 x/x^2$, описывающая естественную форму спектральной линии.

Фигурирующий здесь множитель $\sin^2 x/x^2$ имеет резкий максимум при $x=0$ (фиг. 70), поэтому основной вклад в интеграл

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi$$

происходит от области $|x| < \pi$. Внутри этого интервала мы, очевидно, имеем $|2x/t| < 2\pi/t$. Так как в рассматриваемом случае должно выполняться условие (181.10), согласно которому

$$|\langle l | \mathscr{H} | 0 \rangle| \ll \frac{\hbar}{t},$$

и так как матричный элемент обычно мал по сравнению с энергией возбуждения, то аргумент функции ρ можно заменить разностью $\omega_l - \omega_0$. Аналогичными соображениями можно воспользоваться и при рассмотрении матричного элемента, который можно, таким образом, считать не зависящим от переменной интегрирования x . В результате получаем выражение

$$|a_l(t)|^2 = 2\pi t \left| \langle l | \frac{\mathscr{H}}{\hbar} | 0 \rangle \right|^2 \rho(\omega_l - \omega_0), \quad (182.6)$$

из которого видно, что вероятность обнаружить систему в состоянии $|l\rangle$ растет пропорционально времени t . Это позволяет ввести не зависящую от времени *вероятность перехода*, опреде-

лив ее соотношением

$$P_i = \frac{1}{t} |a_i(t)|^2. \quad (182.7)$$

В силу (182.6) вероятность перехода имеет вид

$$P_i = 2\pi \left\langle l \left| \frac{\mathcal{H}'}{\hbar} \right| 0 \right\rangle^2 \rho(\omega_i - \omega_0). \quad (182.8)$$

Замечание. Последнее выражение по форме очень напоминает золотое правило, которое рассматривается в задаче 183. Следует, однако, иметь в виду, что золотое правило получается в результате суммирования по близко лежащим *конечным* состояниям, в то время как выражение (182.8) получено путем интегрирования по непрерывному спектру частот *внешнего* возбуждающего поля. При этом мы приняли без доказательства, что суммировать необходимо не амплитуды [выражение (182.2)], а вероятности [выражение (182.5)].

Задача 183. Золотое правило для рассеяния

Пучок частиц с начальным импульсом $p_i = \hbar k_i$ упруго рассеивается на потенциале $W(r)$ внутри телесного угла $d\Omega_f$, причем в конечном состоянии $p_f = \hbar k_f$. Пользуясь нестационарной теорией возмущений Дирака, получить дифференциальное сечение рассеяния $d\sigma/d\Omega_f$.

Решение. Согласно (181.9), в первом порядке нестационарной теории возмущений Дирака

$$a_f(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \langle f | W | i \rangle e^{-i(\omega_i - \omega_f)t'} dt'. \quad (183.1)$$

Если матричный элемент не зависит от времени, то этот интеграл легко вычислить, и в результате получаем следующую основную формулу:

$$|a_f(t)|^2 = \frac{4}{\hbar^2} \frac{|\langle f | W | i \rangle|^2}{(\omega_i - \omega_f)^2} \sin^2 \frac{(\omega_i - \omega_f)t}{2}. \quad (183.2)$$

И начальное и конечное состояния принадлежат непрерывному спектру. Вводя нормировочный объем, соответствующие волновые функции можно записать в виде

$$|i\rangle = V^{-1/2} e^{ik_i \cdot r}, \quad \langle f| = V^{-1/2} e^{-ik_f \cdot r}. \quad (183.3)$$

При конечном объеме V в окрестности состояния $\langle f|$ имеется очень большое число близких к нему состояний, причем в пределе $V \rightarrow \infty$ даже в бесконечно малой окрестности их число оказывается бесконечным. По этой причине вопрос о вероятности перехода в *одно* отдельно взятое конечное состояние $\langle f|$ с вполне

определенным значением импульса $\hbar k_f$, становится бессмысленным, и мы можем спрашивать лишь о вероятности обнаружить рассеянные частицы в некотором интервале конечных состояний.

Пусть $\rho_f(E_f) dE_f$ означает число состояний внутри интервала dE_f конечных энергий E_f и пусть эти состояния характеризуются импульсами, лежащими внутри телесного угла $d\Omega_f$, тогда вероятность перехода в единицу времени в указанный интервал телесных углов будет определяться выражением

$$dT = \frac{1}{t} \int |a_f(t)|^2 \rho_f(E_f) dE_f. \quad (183.4)$$

Такое определение является разумным лишь в силу того, что приведенное выражение не зависит от времени, а интегрирование фактически распространяется на очень узкий интервал энергий.

Перейдем к новой переменной интегрирования

$$x = \frac{1}{2} (\omega_f - \omega_i) t$$

и положим, кроме того,

$$E_f = \hbar \omega_f,$$

тогда

$$dE_f = \frac{2\hbar}{t} dx.$$

Отсюда, согласно формулам (183.2) и (183.4), получаем

$$dT = \frac{2}{\hbar} \int \rho_f(E_f) \frac{\sin^2 x}{x^2} | \langle f | W | i \rangle |^2 dx.$$

При вычислении последнего интеграла мы вправе воспользоваться соображениями, изложенными в предыдущей задаче. Вклад в интеграл по очень большому интервалу переменной x с центром в точке $x=0$ дают лишь состояния из очень узкого интервала энергий с центром в точке $E_f = E_i$, поэтому

$$dT = \frac{2\pi}{\hbar} \rho_f(E_f) | \langle f | W | i \rangle |^2. \quad (183.5)$$

Для вероятности перехода целесообразно сохранить обозначение в виде дифференциала dT , так как в величине ρ_f пока еще содержится бесконечно малый интервал телесных углов $d\Omega_f$ (возможно, что в связи с этим саму величину ρ_f было бы лучше обозначать посредством $d\rho_f$). Равенство (183.5) называют *золотым правилом*.

Полученная вероятность перехода очевидным образом зависит от нормировочного объема V и от начальной скорости $v_0 = \hbar k_i / m$ сталкивающихся с мишенью частиц. Вместо вероятности пере-

хода целесообразно ввести величину $d\sigma$, не зависящую от нормировочного объема V , определив ее равенством

$$dT = \frac{v_0}{V} d\sigma. \quad (183.6)$$

Эта величина имеет размерность см^2 и представляет собой дифференциальное сечение рассеяния, причем, согласно золотому правилу (183.5),

$$d\sigma = \frac{2\pi}{\hbar} \rho_f(E) \frac{V}{v_0} |\langle f | W | i \rangle|^2. \quad (183.7)$$

Таким образом, нам остается вычислить плотность конечных состояний ρ_f и получить выражение для матричного элемента.

Плотность конечных состояний можно вычислить, приняв во внимание, что на одно состояние бесспиновой частицы в импульсном пространстве приходится объем, равный $(2\pi\hbar)^3/V$. Поэтому в произвольном элементе объема импульсного пространства d^3p содержится

$$\frac{d^3pV}{8\pi^3\hbar^3}$$

состояний. Учитывая, что

$$d^3p = p^2 dp d\Omega = mp dE d\Omega,$$

получаем

$$\rho_f dE_f = \frac{mp_f dE_f d\Omega_f V}{8\pi^3\hbar^3}. \quad (183.8)$$

и, следовательно,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f} = \left(\frac{mV}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \frac{k_f}{k_i} |\langle f | W | i \rangle|^2. \quad (183.9)$$

В случае упругого рассеяния множитель $k_f/k_i = 1$ и его в дальнейшем можно опустить.

Для сферически симметричного потенциала $W(r)$ матричный элемент между состояниями, описываемыми плоскими волнами (183.3), имеет вид

$$\langle f | W | i \rangle = \frac{1}{V} \int e^{-i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} W(r) d^3x, \quad (183.10)$$

где $\mathbf{K} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$ — так называемый переданный импульс (в единицах \hbar). Интегрирование по угловым переменным дает

$$\langle f | W | i \rangle = \frac{4\pi}{V} \int_0^\infty W(r) \frac{\sin Kr}{Kr} r^2 dr, \quad (183.11)$$

поэтому окончательно получаем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f} = \left| \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 W(r) \frac{\sin Kr}{Kr} dr \right|^2. \quad (183.12)$$

Результат (183.12), как и следовало ожидать, совпадает с формулой первого борновского приближения (см. задачу 105). Действительно, наша исходная формула (183.1) уже предполагает, что рассеивающий потенциал $W(r)$ рассматривается в качестве возмущения; именно по этой причине для описания начального и конечного состояний были использованы плоские волны.

Задача 184. Борновское рассеяние в импульсном представлении

Пользуясь импульсным представлением и ограничиваясь первым порядком нестационарной теории возмущений, получить выражение для дифференциального сечения рассеяния. Считать, что возмущение включается в момент времени $t=0$, а затем остается постоянным.

Решение. Как было показано в задаче 14, при переходе к импульсному представлению нестационарное уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(\mathbf{r}) \psi \quad (184.1)$$

заменяется интегро-дифференциальным уравнением вида

$$-\frac{\hbar}{i} \dot{f}(\mathbf{k}, t) = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 f(\mathbf{k}, t) + \int W(\mathbf{k}-\mathbf{k}') f(\mathbf{k}', t) d^3k', \quad (184.2)$$

где $f(\mathbf{k}, t)$ и $W(\mathbf{k})$ соответственно фурье-образы $\psi(\mathbf{r}, t)$ и $V(\mathbf{r})$ (нормировка та же, что и в задаче 14). Уравнение (184.2) можно несколько упростить, введя вместо f новую функцию:

$$f(\mathbf{k}, t) = v(\mathbf{k}, t) e^{-i\omega t}, \quad \omega = \frac{\hbar}{2m} k^2. \quad (184.3)$$

Мы имеем

$$\frac{\partial v(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \int e^{i(\omega-\omega')t} W(\mathbf{k}-\mathbf{k}') v(\mathbf{k}', t) d^3k'. \quad (184.4)$$

При решении уравнения (184.4) в первом порядке теории возмущений функцию v в подынтегральном выражении следует заменить невозмущенной волновой функцией

$$v_0(\mathbf{k}, t) = C (2\pi)^{3/2} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0), \quad (184.5)$$

которая представляет собой фурье-образ плоской волны:

$$\psi_0(\mathbf{r}, t) = C e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}}. \quad (184.6)$$

В результате уравнение (184.4) приобретает вид

$$\frac{\partial v(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} C (2\pi)^{3/2} W(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) e^{i(\omega - \omega_0)t}.$$

Решением этого уравнения служит функция

$$v(\mathbf{k}, t) = -\frac{C}{\hbar} (2\pi)^{3/2} W(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) \frac{e^{i(\omega - \omega_0)t} - 1}{\omega - \omega_0}. \quad (184.7)$$

Следовательно, вероятность обнаружить частицу с импульсом \mathbf{k} внутри интервала d^3k в момент времени t (см. задачу 15) дается выражением

$$|v(\mathbf{k}, t)|^2 d^3k = \frac{|C|^2 (2\pi)^3}{\hbar^2} |W(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)|^2 t^2 \frac{\sin^2 x}{x^2} k^2 dk d\Omega,$$

где для краткости мы положили

$$x = \frac{1}{2} (\omega - \omega_0) t.$$

Так как

$$k dk = \frac{2m}{\hbar t} dx$$

и

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin^2 x}{x^2} dx = \pi,$$

то вероятность перехода, определенная равенством

$$dT = \frac{1}{t} d\Omega \int k^2 |v(\mathbf{k}, t)|^2 dk, \quad (184.8)$$

после интегрирования по dk принимает вид

$$dT = \frac{|C|^2 (2\pi)^4 m k}{\hbar^3} |W(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)|^2 d\Omega, \quad (184.9)$$

причем выше (см. задачу 183) $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0|$. Дифференциальное сечение связано по определению с вероятностью перехода соотношением

$$dT = |C|^2 v_0 d\sigma = |C|^2 \frac{\hbar k}{m} d\sigma, \quad (184.10)$$

поэтому

$$d\sigma = \frac{(2\pi)^4 m^2}{\hbar^4} |W(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)|^2 d\Omega. \quad (184.11)$$

В случае центрального взаимодействия эту общую формулу можно несколько упростить, так как при вычислении фурье-

образа потенциала $V(r)$ удается провести интегрирование по угловым переменным. Мы имеем

$$W(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} V(r) d^3x = \frac{4\pi}{(2\pi)^3} \int_0^\infty V(r) \frac{\sin Kr}{Kr} r^2 dr, \quad (184.12)$$

где $\mathbf{K} = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ — переданный импульс (в единицах \hbar), причем K и угол рассеяния ϑ связаны соотношением

$$K = 2k_0 \sin \frac{\vartheta}{2}. \quad (184.13)$$

Подставляя теперь выражение (184.12) в формулу (184.11), получаем хорошо известный результат для сечения рассеяния в первом борновском приближении:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty V(r) \frac{\sin Kr}{Kr} r^2 dr \right\}^2. \quad (184.14)$$

Замечание. Переход от волновой функции f , описывающей состояние частицы в импульсном представлении, к функции v соответствует в общем случае переходу от картины Шредингера к картине Дирака (представление взаимодействия). В отсутствие взаимодействия $W(\mathbf{k})$ функция v не зависела бы от времени t . Формула для сечения рассеяния (184.14) была нами выведена ранее в задаче 105. Заметим также, что фурье-образ $W(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)$ с точностью до нормировочного множителя есть матричный элемент потенциала $V(\mathbf{r})$ в обычном пространстве:

$$(2\pi)^3 W(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = \int e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} V(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} d^3x = \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k}_0 \rangle.$$

С учетом последнего замечания формуле для сечения рассеяния (184.11) можно придать вид

$$d\sigma = \left| \frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle \mathbf{k} | V | \mathbf{k}_0 \rangle \right|^2 d\Omega. \quad (184.15)$$

Задача 185. Кулоновское возбуждение атома

Пусть на расстоянии b (прицельное расстояние) от атома щелочного металла пролетает электрон. Скорость электрона v предполагается большой по сравнению со скоростью валентного электрона в атоме. В результате кулоновского взаимодействия атом может перейти в возбужденное состояние. С помощью нестационарной теории возмущений рассчитать эффективное сечение такого процесса.

Решение. Будем описывать положение валентного электрона относительно атомного остова (фиг. 71) радиус-вектором $\mathbf{r}(x, y, z)$. Если налетающий электрон находится в точке P , то энергию его

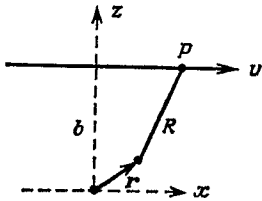
взаимодействия с валентным электроном можно записать в виде

$$V(t) = \frac{e^2}{R(t)}, \quad (185.1)$$

где

$$R^2 = (vt - x)^2 + y^2 + (b - z)^2. \quad (185.2)$$

Ниже будем пренебрегать эффектами, связанными с замедлением или отклонением налетающего электрона. Кроме того, рассматривая налетающий электрон как классическую частицу, мы, конечно, не учитываем и все обменные эффекты.



Фиг. 71. Схема столкновения электрона с атомом.

Если длина волны налетающего электрона мала по сравнению с прицельным расстоянием b и с линейными размерами атома, то такое приближение вполне разумно. Для простоты будем также считать, что прицельное расстояние b в свою очередь велико по сравнению с линейными размерами атома, и, следовательно, можно воспользоваться разложением

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{\sqrt{(vt)^2 + b^2}} \left[1 + \frac{vtx + bz}{(vt)^2 + b^2} \right]. \quad (185.2a)$$

В этом приближении матричный элемент перехода из основного состояния (индекс 0) в возбужденное (индекс k) записывается в виде

$$\langle k | V(t) | 0 \rangle = \frac{e^2}{[(vt)^2 + b^2]^{3/2}} [vt \langle k | x | 0 \rangle + b \langle k | z | 0 \rangle], \quad (185.3)$$

поскольку первый (статический) член из выражения (185.2a) дает вклад только в диагональный матричный элемент $\langle 0 | V | 0 \rangle$, отвечающий упругому рассеянию.

Если невозмущенное состояние $|k\rangle$ удовлетворяет уравнению Шредингера

$$H |k\rangle = \hbar \omega_k |k\rangle,$$

то возмущенное состояние записывается в виде

$$|\psi\rangle = e^{-i\omega_0 t} |0\rangle + \sum_k' a_k(t) e^{-i\omega_k t} |k\rangle, \quad (185.4)$$

где (см. задачу 181)

$$a_k(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t e^{i(\omega_k - \omega_0)t'} \langle k | V(t') | 0 \rangle dt'. \quad (185.5)$$

Отсюда вероятность обнаружить атом в возбужденном состоянии $|k\rangle$ после того, как процесс столкновения закончится, равна

$$p_k = |a_k(\infty)|^2, \quad (185.6)$$

а эффективное сечение возбуждения состояния $|k\rangle$ получается из нее интегрированием по прицельному расстоянию:

$$\sigma_k = 2\pi \int_0^{\infty} |a_k(\infty)|^2 t db. \quad (185.7)$$

Таким образом, задача в основном сводится к вычислению амплитуды $a_k(\infty)$. После подстановки выражения для матричного элемента (185.3) получаем

$$a_k(\infty) = -\frac{i}{\hbar} e^{i\omega_k t} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i(\omega_k - \omega_0)t}}{[(vt)^2 + b^2]^{3/2}} [vt \langle k|x|0\rangle + b \langle k|z|0\rangle] dt.$$

Вводя обозначения

$$\beta = \frac{(\omega_k - \omega_0) b}{v}, \quad s = \frac{v}{b} t, \quad (185.8)$$

последнее выражение можно переписать в виде

$$a_k(\infty) = -\frac{ie^2}{\hbar vb} \left\{ \langle k|x|0\rangle \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{se^{i\beta s}}{(1+s^2)^{3/2}} ds + \langle k|z|0\rangle \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\beta s}}{(1+s^2)^{3/2}} ds \right\}. \quad (185.9)$$

Оба фигурирующие здесь интеграла нетрудно вычислить, воспользовавшись интегральным представлением модифицированной функции Ханкеля:

$$\beta K_1(\beta) = \int_0^{\infty} \frac{\cos \beta s}{(1+s^2)^{3/2}} ds. \quad (185.10)$$

Последний интеграл можно представить в ином виде:

$$\frac{1}{2} \int_0^{\infty} \frac{e^{i\beta s}}{(1+s^2)^{3/2}} ds + \frac{1}{2} \int_0^{\infty} \frac{e^{-i\beta s}}{(1+s^2)^{3/2}} ds = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\beta s}}{(1+s^2)^{3/2}} ds,$$

поэтому

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\beta s}}{(1+s^2)^{3/2}} ds = 2\beta K_1(\beta). \quad (185.11)$$

Дифференцируя равенство (185.11) по β , получаем

$$i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{se^{i\beta s}}{(1+s^2)^{3/2}} ds = 2 \frac{d}{d\beta} [\beta K_1(\beta)] = -2\beta K_0(\beta). \quad (185.12)$$

Таким образом, имеем

$$a_k(\infty) = -\frac{e^2}{\hbar v} \cdot \frac{2}{b} \cdot \{ \langle k|x|0\rangle (-\beta K_0(\beta)) + i \langle k|z|0\rangle \beta K_1(\beta) \}. \quad (185.13)$$

Если атом не поляризован, то усреднение по поляризации дает

$$\overline{\langle k|x|0\rangle} = \overline{\langle k|z|0\rangle} = 0, \quad \overline{|\langle k|x|0\rangle|^2} = \overline{|\langle k|z|0\rangle|^2}, \quad (185.14)$$

поэтому

$$\overline{|a_k(\infty)|^2} = \left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2 \cdot \frac{4}{b^2} \cdot \overline{|\langle k|x|0\rangle|^2} \beta^2 [K_0^2(\beta) + K_1^2(\beta)]. \quad (185.15)$$

С учетом соотношений (185.7) и (185.8) для эффективного сечения возбуждения состояния $|k\rangle$ получаем

$$\sigma_k = 8\pi \left(\frac{e^2}{\hbar v}\right)^2 \overline{|\langle k|x|0\rangle|^2} \int_0^\infty [K_0^2(\beta) + K_1^2(\beta)] \beta d\beta. \quad (185.16)$$

Если бы в последнем интеграле нижний предел был отличен от нуля, то мы могли бы написать

$$\int_\beta^\infty [K_0^2(\beta') + K_1^2(\beta')] \beta' d\beta' = \beta K_0(\beta) K_1(\beta). \quad (185.17)$$

При малых значениях β справедливы предельные соотношения

$$\beta K_1(\beta) \rightarrow 1, \quad K_0(\beta) \rightarrow -C + \ln \frac{2}{\beta}, \quad (185.18)$$

где $C = 0,5772\dots$ — постоянная Эйлера. Таким образом, рассматриваемый интеграл расходится при малых значениях β , т. е., согласно (185.8), при малых значениях прицельного расстояния b . Эта расходимость связана с использованием разложения (185.2а) для энергии взаимодействия, которое имеет смысл лишь в том случае, если расстояние r между валентным электроном и атомным остовом мало по сравнению с прицельным расстоянием b . Возникшую расходимость можно устранить, полагая $b_{\text{мин}} = r_0$, где r_0 — эффективный радиус атома. Согласно соотношению (185.8), имеем

$$\beta_{\text{мин}} = \frac{r_0(\omega_k - \omega_0)}{v}. \quad (185.19)$$

Так как скорость v должна быть велика по сравнению со скоростью валентного электрона, то $\beta_{\text{мин}} \ll 1$ и мы можем пользоваться соотношениями (185.18). В результате для эффективного сечения возбуждения атома получаем

$$\sigma_k = 8\pi \left(\frac{e^2}{\hbar v} \right)^2 \overline{|k|x|0\rangle|^2} \left\{ \ln \frac{2v}{r_0(\omega_k - \omega_0)} - C \right\}. \quad (185.20)$$

Точное значение обрезавшего радиуса r_0 несущественно, так как он стоит под знаком логарифма, а логарифмическая функция сравнительно медленно меняется при изменении ее аргумента.

Примечание. Метод, использованный при решении этой задачи, заимствован нами из теории кулоновского возбуждения атомных ядер: см., например, Alder K. Winther W., Dan. Mat.-Fys. Medd. 29, 19 (1955).

Задача 186. Фотозффект

На атом водорода, находящийся в основном состоянии, падает линейно поляризованная световая волна ($\mathcal{E} \parallel x$, $\mathcal{H} \parallel y$), распространяющаяся в положительном направлении оси z . Найти угловое распределение фотоэлектронов и вычислить дифференциальное сечение фотозффекта. Считать, что электроны в конечном состоянии приближенно можно описывать плоскими волнами. Эфффекты запаздывания не учитывать.

Решение. Световую волну можно описать, задав вектор-потенциал A в виде

$$A_x = \frac{c}{\omega} \mathcal{E}_0 \cos \left[\omega \left(t - \frac{z}{c} \right) + \delta \right], \quad A_y = 0, \quad A_z = 0, \quad (186.1)$$

при этом отличные от нуля компоненты напряженностей электрического и магнитного полей будут равны

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_x &= -\frac{1}{c} \dot{A}_x = \mathcal{E}_0 \sin \left[\omega \left(t - \frac{z}{c} \right) + \delta \right], \\ \mathcal{H}_y &= \frac{\partial A_x}{\partial z} = \mathcal{E}_0 \sin \left[\omega \left(t - \frac{z}{c} \right) + \delta \right]. \end{aligned}$$

Усредненный вектор Умова—Пойнтинга направлен вдоль оси z и имеет величину

$$\bar{S} = \frac{c}{4\pi} \overline{\mathcal{E}_x \mathcal{H}_y} = \frac{c}{8\pi} \mathcal{E}_0^2.$$

Отсюда для числа фотонов, падающих в 1 с на 1 см², получаем

$$n = \frac{c \mathcal{E}_0^2}{8\pi \hbar \omega}. \quad (186.2)$$

Энергия взаимодействия между световой волной и атомным электроном, согласно задаче 125, имеет вид

$$W = -\frac{e\hbar}{mc} i (A \cdot \nabla) = W e^{-i\omega t} + W^\dagger e^{i\omega t}, \quad (186.3)$$

где

$$W = -\frac{e\hbar}{2m\omega} \mathcal{E}_0 i e^{-i\delta} \frac{\partial}{\partial x}. \quad (186.4)$$

Выше множитель $\exp(i\omega z/c)$, учитывающий запаздывание, мы положили равным 1.

Теперь можно применить метод, развитый в задаче 182. Резонансный знаменатель $\omega_f - \omega_i - \omega$, обеспечивающий выполнение закона сохранения энергии, имеется лишь в члене W . Полагая

$$x = \frac{1}{2} (\omega_f - \omega_i - \omega) t,$$

получаем

$$|a_f(t)|^2 = \frac{4}{\hbar^2} |\langle f | W | i \rangle|^2 \frac{\sin^2 x}{x^2}.$$

Отсюда для вероятности перехода P_f из начального состояния $|i\rangle$ в конечное состояние $|f\rangle$ находим выражение

$$P_f = \frac{2\pi}{\hbar} \rho_f |\langle f | W | i \rangle|^2, \quad (186.5)$$

в котором ρ_f означает плотность электронов в конечном состоянии. Согласно соотношению (183.8), имеем

$$\rho_f = \frac{mV}{8\pi^3 \hbar^2} k_f d\Omega_f. \quad (186.6)$$

Здесь V — нормировочный объем, а $\hbar k_f$ — величина импульса фотоэлектрона. Дифференциальное сечение фотоэмиссии в телесный угол $d\Omega_f$ определяется как отношение P_f/n , поэтому с учетом соотношений (186.2) и (186.4) — (186.6) можно написать

$$d\sigma = \frac{e^2 V}{2\pi m c \omega} k_f d\Omega_f \left| \left\langle f \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| i \right\rangle \right|^2. \quad (186.7)$$

Мы имеем дело с центральным взаимодействием, так что волновая функция основного состояния $|i\rangle$ не зависит от угловых переменных и, следовательно, производная

$$\frac{\partial}{\partial x} |i\rangle = \frac{d|i\rangle}{dr} \sin \vartheta \cos \varphi \quad (186.8)$$

пропорциональна сферической гармонике первого порядка, поэтому матричный элемент не исчезает только в том случае, если состояние фотоэлектрона является p -состоянием.

Пусть конечное состояние фотоэлектрона приближенно описывается плоской волной, тогда

$$|f\rangle = V^{-1/2} e^{ik_f \cdot r \cos \gamma} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(k_f r) P_l(\cos \gamma), \quad (186.9)$$

где γ означает угол между векторами k_f и r . Как уже говорилось, из этой суммы вклад в матричный элемент дает лишь один член (p -состояние) с $l=1$:

$$\langle f | \frac{\partial}{\partial x} | i \rangle = \frac{3i}{\sqrt{V}} \int_0^{\infty} \frac{j_1(kr)}{kr} \cdot \frac{d|i\rangle}{dr} r^2 dr \oint \cos \gamma \sin \vartheta \cos \varphi d\Omega.$$

Учитывая далее, что

$$\cos \gamma = \cos \vartheta \cos \Theta + \sin \vartheta \sin \Theta (\cos \varphi \cos \Phi + \sin \varphi \sin \Phi),$$

где Θ , Φ и ϑ , φ — сферические углы соответственно векторов k_f и r , нетрудно выполнить интегрирование по $d\Omega$:

$$\sin \Theta \cos \Phi \oint \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi d\Omega = \frac{4\pi}{3} \sin \Theta \cos \Phi.$$

Таким образом,

$$\langle f | \frac{\partial}{\partial r} | i \rangle = \frac{4\pi i}{\sqrt{V}} \sin \Theta \cos \Phi \int_0^{\infty} \frac{j_1(k_f r)}{k_f r} \frac{d|i\rangle}{dr} r^2 dr,$$

так что в силу (186.7) имеем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f} = \frac{8\pi e^2}{m c \omega k_f} \left\{ \int_0^{\infty} r j_1(k_f r) \frac{d|i\rangle}{dr} dr \right\}^2 \sin^2 \Theta \cos^2 \Phi. \quad (186.10)$$

Для получения хороших количественных результатов фигурирующую в последнем выражении радиальную функцию j_1 следует заменить более точным выражением (напомним, что радиальная функция j_1 появляется у нас в результате использования приближения плоских волн¹⁾). Однако угловое распределение фотоэлектронов полученная формула описывает правильно. Такое распределение согласуется и с классическими представлениями, поскольку функция $\sin^2 \Theta \cos^2 \Phi$ достигает максимума, когда фотоэлектроны вылетают параллельно оси x , вдоль которой направлен вектор электрической напряженности.

¹⁾ Приближение плоских волн приводит к правильным количественным результатам, если наряду с первым учесть второе борновское приближение. См., например, Лысов Б. А., Изв. вузов, Физика, 1, 71 (1961). — Прим. ред.

Замечание. Для К-электрона

$$|i\rangle = \pi^{-1/2} a^{-3/2} e^{-r/a}, \quad a = \frac{\hbar^2}{(Z-s)me^2}$$

(по поводу экранировочной постоянной s см. задачу 178), поэтому интеграл из формулы (186.10) можно записать в виде

$$J = \int_0^{\infty} j_1(k_f r) \frac{d|i\rangle}{dr} r dr = -\frac{1}{k_f^2 a^2 \sqrt{\pi a}} \int_0^{\infty} \left(\frac{\sin x}{x} - \cos x \right) e^{-\frac{x}{k_f a}} x dx,$$

где $x = k_f r$. Интеграл вычисляется элементарными методами, и мы получаем

$$J = -\frac{2}{\sqrt{\pi a}} \cdot \frac{k_f^2 a^2}{(1 + k_f^2 a^2)^2}.$$

Эта формула справедлива при условии $k_f a \gg 1$, поскольку в противном случае приближение плоских волн становится несостоятельным. Таким образом, имеем

$$J \approx -\frac{2}{\sqrt{\pi a}} (k_f a)^{-2}$$

и

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f} = \frac{32e^2}{mca^5} \cdot \frac{1}{\omega k_f^5} \sin^2 \Theta \cos^2 \Phi.$$

Учитывая далее равенство

$$\frac{\hbar^2 k_f^2}{2m} = \hbar \omega_f,$$

окончательно получаем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_f} \approx 8 (Z-s)^5 \sin^2 \Theta \cos^2 \Phi \cdot \frac{e^2}{\hbar c} \cdot \frac{m^3 e^{10}}{\hbar^7} \cdot \frac{1}{\omega \omega_f^2 k_f}.$$

Более точные расчеты подтверждают в общих чертах вытекающие из этой формулы выводы: быстрое увеличение сечения с ростом величины $Z-s$, быстрое убывание сечения, примерно как $\omega^{-3,5}$, с ростом энергии кванта $\hbar\omega$, правильное угловое распределение электронов и, наконец, правильный порядок величины сечения фотоэффекта.

Литература

Stobbe M., Ann. Phys., 7, 661 (1930).

Учет запаздывания для водорода:

Sommerfeld A., Schur G., Ann. Phys., 4, 409 (1930).

Релятивистская теория:

Sauter F., Ann. Phys., 11, 454 (1931).

Задача 187. Дисперсия света. Силы осцилляторов

Световая волна, рассмотренная в предыдущей задаче, но с $\delta = 0$, взаимодействует с атомом. Считая, что во взаимодействии участвует только один электрон, найти индуцированную поляризацию и получить из нее выражение для сил осцилляторов.

Пренебрегая запаздыванием, выразить все встречающиеся в задаче матричные элементы через матричные элементы электрического дипольного момента.

Решение. В обозначениях задачи 181 состояние атома, находящегося под действием световой волны, записывается в виде

$$|\psi\rangle = \sum_l a_l(t) |l\rangle e^{-i\omega_l t},$$

где $|l\rangle$ — состояние невозмущенного атома. Используя выражение (182.2) для коэффициентов $a_l(t)$ и опуская в нем члены, связанные с процедурой включения световой волны, получаем

$$|\psi\rangle = |0\rangle e^{-i\omega_0 t} - \frac{1}{\hbar} \sum_l \left\{ \langle l | \mathbf{W} | 0 \rangle \frac{e^{i(\omega_l - \omega_0 - \omega)t}}{\omega_l - \omega_0 - \omega} + \langle l | \mathbf{W}^\dagger | 0 \rangle \frac{e^{i(\omega_l - \omega_0 + \omega)t}}{\omega_l - \omega_0 + \omega} \right\} |l\rangle e^{-i\omega_l t}.$$

Выше $|0\rangle$ означает основное состояние атома, а $|l\rangle$ — любое его возбужденное состояние, так что $\omega_l - \omega_0 > 0$, и только член, стоящий в сумме первым, имеет резонансный характер. Пренебрегая нерезонансным членом, можно записать состояние атома в виде

$$|\psi\rangle = \left\{ |0\rangle - \frac{1}{\hbar} e^{-i\omega t} \sum_l \frac{\langle l | \mathbf{W} | 0 \rangle}{\omega_l - \omega_0 - \omega} |l\rangle \right\} e^{-i\omega_0 t}. \quad (187.1)$$

Мы знаем, что оптические свойства определяются в основном индуцированным дипольным моментом $\mathbf{p}_{\text{инд}}$, который определяется соотношением

$$\mathbf{p}_{\text{инд}} = -e \left\{ \int \langle \psi | \mathbf{r} | \psi \rangle d^3x - \langle 0 | \mathbf{r} | 0 \rangle \right\}. \quad (187.2)$$

Подставляя сюда выражение (187.1) и пренебрегая поправками второго порядка, получаем

$$\mathbf{p}_{\text{инд}} = \frac{e}{\hbar} \sum_l \frac{\langle 0 | \mathbf{r} | l \rangle \langle l | \mathbf{W} | 0 \rangle e^{-i\omega t} + \langle l | \mathbf{r} | 0 \rangle \langle l | \mathbf{W} | 0 \rangle^* e^{i\omega t}}{\omega_l - \omega_0 - \omega}. \quad (187.3)$$

Это выражение можно значительно упростить, заменив матричные элементы $\langle l | \mathbf{W} | 0 \rangle$ энергии взаимодействия

$$\mathbf{W} = -\frac{e\hbar}{2m\omega} \mathcal{G}_0 i \frac{\partial}{\partial x} \quad (187.4)$$

матричными элементами электрического дипольного момента атома \mathbf{p} в направлении электрического поля световой волны:

$$\langle l | p_x | 0 \rangle = -e \langle l | x | 0 \rangle. \quad (187.5)$$

Такую замену можно сделать, воспользовавшись соотношением

$$\left\langle l \left| \frac{\partial}{\partial x} \right| k \right\rangle = \frac{m}{\hbar} (\omega_k - \omega_l) \langle l | x | k \rangle; \quad (187.6)$$

оно справедливо для любой пары состояний $|l\rangle$ и $|k\rangle$.

Соотношение (187.6) можно вывести, например, следующим образом. Из уравнений Шредингера

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) |k\rangle &= \hbar\omega_k |k\rangle, \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \langle l| &= \hbar\omega_l \langle l| \end{aligned}$$

после почленного умножения на $\langle l | x | x | k \rangle$ соответственно и последующего вычитания одного уравнения из другого получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \{ \langle l | x \nabla^2 | k \rangle - \langle k | x \nabla^2 | l \rangle^* \} = \hbar (\omega_k - \omega_l) \langle l | x | k \rangle. \quad (187.6a)$$

Так как

$$\int (vx) \nabla^2 u \, d^3x = - \int \nabla (vx) \cdot \nabla u \, d^3x = - \int \left(x \nabla v \cdot \nabla u + v \frac{\partial u}{\partial x} \right) d^3x,$$

то выражение, стоящее в фигурных скобках в (187.6a), можно записать в виде

$$-\langle l | \frac{\partial}{\partial x} | k \rangle + \langle k | \frac{\partial}{\partial x} | l \rangle^* = -2 \langle l | \frac{\partial}{\partial x} | k \rangle.$$

Подставляя это выражение в формулу (187.6a), легко получаем соотношение (187.6).

С помощью соотношения (187.6) выражение для индуцированного дипольного момента (187.3) преобразуется к виду

$$\mathbf{p}_{\text{инд}} = -\frac{\mathcal{E}_0}{2i\hbar} \sum_l \frac{\langle 0 | \mathbf{p} | l \rangle \langle l | p_x | 0 \rangle e^{-i\omega_l t} - \langle l | \mathbf{p} | 0 \rangle \langle l | p_x | 0 \rangle^* e^{i\omega_l t}}{\omega_l - \omega_0 - \omega}. \quad (187.7)$$

Если атомы статистически независимы, то их дипольные моменты \mathbf{p} с равной вероятностью могут иметь любое направление, поэтому при усреднении y -компонента и z -компонента вектора $\mathbf{p}_{\text{инд}}$ обратятся в нуль и останется лишь компонента индуцированного дипольного момента в направлении оси x , т. е. в направлении приложенного к атому электрического поля. Для дальнейшего заметим, что в силу эрмитовости оператора \mathbf{p}

$$\langle 0 | \mathbf{p} | l \rangle = \langle l | \mathbf{p} | 0 \rangle^*.$$

тогда

$$\overline{|\langle l | p_x | 0 \rangle|^2} = \frac{1}{3} \overline{|\langle l | \mathbf{p} | 0 \rangle|^2},$$

причем в правой части последнего соотношения нет необходимости в усреднении, так как там стоит выражение, не зависящее от ориентации атома. Таким образом, получаем

$$P_{\text{инд}} = \frac{\mathcal{E}_0}{3\hbar} \sum_l \frac{|\langle l | p | 0 \rangle|^2}{\omega_l - \omega_0 - \omega} \sin \omega t.$$

Поскольку выражение

$$\mathcal{E}_0 \sin \omega t = \mathcal{E}$$

представляет собой мгновенное значение напряженности электрического поля, можно определить поляризуемость атома α , полагая, как обычно,

$$P_{\text{инд}} = \alpha \mathcal{E}.$$

Отсюда имеем

$$\alpha = \frac{1}{3} \sum_l \frac{|\langle l | p | 0 \rangle|^2}{\hbar (\omega_l - \omega_0 - \omega)}. \quad (187.8)$$

В классической оптике для показателя преломления n справедлива формула

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{4\pi}{3} N \alpha, \quad (187.9)$$

где N — число атомов в единице объема. Что же касается классической поляризуемости, то она представляет собой сумму вкладов от всех электронов атома и ее можно записать в виде

$$\alpha = \frac{e^2}{m} \sum_{\lambda} \frac{f_{\lambda}}{\omega_{\lambda}^2 - \omega^2}. \quad (187.10)$$

Здесь ω_{λ} — частота собственных механических колебаний электрона номер λ , а так называемая *сила осциллятора* f_{λ} указывает, какое число электронов в атоме имеет частоту собственных колебаний, равную ω_{λ} . Первые сомнения в правомочности классической картины явления были вызваны тем, что силы осцилляторов, как оказалось, не являются целыми числами.

Формально квантовое выражение (187.8) приводит к очень похожему результату. Действительно, мы можем написать

$$\alpha = \frac{1}{3} \sum_l \frac{(\omega_l - \omega_0 + \omega) |\langle l | p | 0 \rangle|^2}{\hbar [(\omega_l - \omega_0)^2 - \omega^2]} \approx \frac{2\omega}{3\hbar} \sum_l \frac{|\langle l | p | 0 \rangle|^2}{(\omega_l - \omega_0)^2 - \omega^2}.$$

Далее из формулы (187.9) следует

$$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} = \frac{4\pi}{3} N \frac{e^2}{m} \sum_l \frac{f_l}{(\omega_l - \omega_0)^2 - \omega^2}, \quad (187.11)$$

где силы осцилляторов теперь определены соотношением

$$f_i = \frac{2m\omega}{3\hbar e^2} |\langle l | \mathbf{p} | 0 \rangle|^2. \quad (187.12)$$

Формальное совпадение квантового результата (187.11) с классической формулой (187.10) оказывается, однако, обманчивым. В выражении (187.11) суммирование происходит не по электронам, а по возбужденным состояниям атома, поэтому суммирование по множеству термов оказывается необходимым даже в нашей одноэлектронной задаче. Вместо частот собственных колебаний ω_l в квантовой формуле фигурируют разности $\omega_l - \omega_0$. И наконец, силы осцилляторов f_i —это уже не числа электронов, а скорее некие постоянные, характеризующие интенсивность дипольных переходов, значения которых определяются, согласно (187.12), матричными элементами электрического дипольного момента. Таким образом, не удивительно, что эти постоянные, вообще говоря, не являются целыми числами.

Задача 188. Спин-флип в магнитной резонансной системе

Частица со спином $1/2 \hbar$ и магнитным моментом μ движется в направлении оси y в постоянном и однородном магнитном поле \mathfrak{H}_0 , которое параллельно оси z . В таком поле спин частицы ориентируется либо в положительном, либо в отрицательном направлении оси z . Для определенности будем считать, что он направлен в положительную сторону. Когда частица в момент времени $t=0$ проходит точку $y=0$, она попадает в область, где действует еще одно однородное поле, \mathfrak{H}' , параллельное оси x . В момент времени $t=t_0$, когда частица проходит точку $y=l$, она покидает область действия поля \mathfrak{H}' . Какова вероятность, что за указанный промежуток времени ориентация спина частицы изменится на противоположную?

Решение. В уравнении Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{i} \dot{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - (\mu \cdot \mathfrak{H}) \psi \quad (188.1)$$

последний член в правой части обусловлен энергией взаимодействия магнитного момента частицы μ с магнитным полем \mathfrak{H} . Оператор магнитного момента определяется равенством

$$\mu = \mu \sigma, \quad (188.2)$$

где σ —вектор, компонентами которого являются матрицы Паули (см. задачу 129).

При $t < 0$ на частицу действует только поле $\mathfrak{H}_0 \parallel z$, поэтому решение уравнения (188.1) записывается в виде

$$\psi = e^{i(ky - \omega t)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (188.3)$$

а энергия частицы равна

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \mathcal{H}_0. \quad (188.4)$$

Если теперь в момент времени $t = 0$ включается поле $\mathfrak{H}' \parallel x$, то состояние частицы начинает меняться и его следует описывать волновой функцией вида

$$\psi = e^{i(ky - \omega_0 t)} \left\{ a(t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b(t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} = e^{i(ky - \omega_0 t)} \begin{pmatrix} a(t) \\ b(t) \end{pmatrix}, \quad (188.5)$$

причем выше мы положили

$$\hbar\omega_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (188.6)$$

Если можно не учитывать искривление траектории частицы, вызванное действием силы Лоренца, которая перпендикулярна оси y , то можно считать, что в направлении оси y импульс частицы $\hbar k$ все время остается постоянным.

При подстановке выражения (188.5) в уравнение (188.1) нужно соблюдать известную осторожность, когда дело касается члена, ответственного за магнитное взаимодействие. Мы имеем

$$(\mu \cdot \mathfrak{H}) = \mu (\mathcal{H}_0 \sigma_z + \mathcal{H}' \sigma_x) = \mu \begin{pmatrix} \mathcal{H}_0 & \mathcal{H}' \\ \mathcal{H}' & -\mathcal{H}_0 \end{pmatrix},$$

и, следовательно,

$$(\mu \cdot \mathfrak{H}) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \mu \begin{pmatrix} \mathcal{H}_0 a + \mathcal{H}' b \\ \mathcal{H}' a - \mathcal{H}_0 b \end{pmatrix}.$$

Расписывая далее уравнение Шредингера по компонентам, получаем

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \dot{a} &= -\mu (\mathcal{H}_0 a + \mathcal{H}' b), \\ -\frac{\hbar}{i} \dot{b} &= -\mu (\mathcal{H}' a - \mathcal{H}_0 b). \end{aligned} \quad (188.7)$$

Чтобы найти решение этой системы уравнений, положим

$$a(t) = A e^{i\omega' t}, \quad b(t) = B e^{i\omega' t},$$

в результате вместо (188.7) у нас получится система линейных

алгебраических уравнений

$$\begin{aligned}(\mu \mathcal{H}_0 - \hbar \omega') A + \mu \mathcal{H}' B &= 0, \\ \mu \mathcal{H}' A - (\mu \mathcal{H}_0 + \hbar \omega') B &= 0.\end{aligned}$$

Определитель этой системы обращается в нуль при условии, что

$$\omega' = \pm \frac{\mu}{\hbar} \sqrt{\mathcal{H}_0^2 + \mathcal{H}'^2}. \quad (188.8)$$

Таким образом, решение системы уравнений (188.7) можно записать в виде

$$\begin{aligned}a(t) &= A_I e^{i\omega' t} + A_{II} e^{-i\omega' t}, \\ b(t) &= B_I e^{i\omega' t} + B_{II} e^{-i\omega' t},\end{aligned}$$

где

$$B_{I, II} = \frac{\pm \sqrt{\mathcal{H}_0^2 + \mathcal{H}'^2} - \mathcal{H}_0}{\mathcal{H}'} A_{I, II}.$$

Постоянные интегрирования A_I и A_{II} определяются из начальных условий:

$$a(0) = 1, \quad b(0) = 0. \quad (188.9)$$

Нетрудно проверить, что

$$A_I = \frac{\sqrt{\mathcal{H}_0^2 + \mathcal{H}'^2} + \mathcal{H}_0}{2\sqrt{\mathcal{H}_0^2 + \mathcal{H}'^2}}$$

и

$$A_{II} = \frac{\sqrt{\mathcal{H}_0^2 + \mathcal{H}'^2} - \mathcal{H}_0}{2\sqrt{\mathcal{H}_0^2 + \mathcal{H}'^2}}.$$

С учетом этих результатов после очевидных преобразований найдем

$$\begin{aligned}a(t) &= \cos \omega' t + i \frac{\mathcal{H}_0}{\sqrt{\mathcal{H}_0^2 + \mathcal{H}'^2}} \sin \omega' t, \\ b(t) &= i \frac{\mathcal{H}'}{\sqrt{\mathcal{H}_0^2 + \mathcal{H}'^2}} \sin \omega' t.\end{aligned} \quad (188.10)$$

Легко убедиться, что

$$|a(t)|^2 + |b(t)|^2 = 1.$$

Вероятность спин-флипа, т. е. вероятность обнаружить, что спин частицы ориентирован в отрицательном направлении оси z после того, как в момент времени $t = t_0 = l/v$ она покинула область, где действует поле \mathcal{H}' , согласно формулам (188.10) и

(188.8), определяется выражением

$$|b(t_0)|^2 = \frac{\mathcal{H}^2}{\mathcal{H}_0^2 + \mathcal{H}^2} \sin^2 \left(\frac{\mu}{\hbar} \sqrt{\mathcal{H}_0^2 + \mathcal{H}^2} t_0 \right). \quad (188.11)$$

Выражение (188.11) показывает, что рассматриваемое экспериментальное устройство можно использовать для определения магнитного момента атома со спином $1/2 \hbar$ (например, атома щелочного металла в основном состоянии). Пучок атомов фокусируется, если спин-флипа не происходит, и дефокусируется, если спин-флип происходит. Меняя в процессе эксперимента напряженности магнитных полей, можно провести интенсивность пучка до минимума:

$$|a(t_0)|_{\text{мин}}^2 = \frac{\mathcal{H}_0^2}{\mathcal{H}_0^2 + \mathcal{H}^2}.$$

Минимум достигается при условии, что

$$\frac{\mu}{\hbar} \sqrt{\mathcal{H}_0^2 + \mathcal{H}^2} \frac{l}{v} = \frac{\pi}{2}. \quad (188.12)$$

Такой способ определения магнитного момента, конечно, возможен только в том случае, если приняты специальные меры, обеспечивающие селекцию скорости, и величина v хорошо известна. Изложенная нами теория, разумеется, является весьма упрощенной, так как она не учитывает целый ряд деталей: отклонение от первоначальной траектории из-за силы Лоренца, неоднородность поля, используемого для фокусировки, поля рассеяния и, самое главное, динамические изменения магнитного момента за счет эффекта Зеемана. Наш подход скорее относится к случаю, когда имеет место эффект Пашена—Бака, т. е. когда связь между орбитальным и спиновым моментами разорвана, но тогда может возникнуть вопрос, законно ли мы пренебрегаем изменением импульса, поскольку такое пренебрежение, очевидно, предполагает, что напряженность магнитного поля мала.

Замечание. Строго говоря, частицу, находящуюся в момент времени $t=0$ в точке $y=0$, следовало бы описывать волновым пакетом (см. задачу 17). Однако в нашем случае это не приносит особой пользы и вводит в рассмотрение волновой пакет нецелесообразно.

VI. Релятивистское уравнение Дирака

Замечание. В этой главе мы используем четвертую координату $x_4 = ict$ и евклидову метрику. Греческие индексы (например, μ) принимают значения 1, 2, 3, 4, а латинские индексы (например, k) — только значения 1, 2, 3.

Задача 189. Квадрирование уравнения Дирака

С помощью релятивистского закона дисперсии для дираковских плоских волн вывести перестановочные соотношения, которым удовлетворяют операторы γ , а также получить неприводимое матричное представление этих операторов, где матрица γ_4 диагональна.

Решение. Если решением уравнения Дирака для свободной частицы

$$\sum_{\mu} \gamma_{\mu} \partial_{\mu} \psi + \kappa \psi = 0 \quad (189.1)$$

является плоская волна

$$\psi = C e^{i(k \cdot r - \omega t)}, \quad (189.2)$$

то величины γ должны удовлетворять алгебраическому соотношению

$$i \sum_{\mu} k_{\mu} \gamma_{\mu} + \kappa = 0, \quad k_4 = \frac{\omega}{c}. \quad (189.3)$$

Кроме того, они не должны зависеть от конкретного выбора величин k_{μ} . Последние можно исключить из соотношения (189.3) лишь с помощью релятивистского закона дисперсии:

$$\sum_{\mu} k_{\mu}^2 \equiv k^2 - \frac{\omega^2}{c^2} = -\kappa^2; \quad (189.4)$$

его можно получить, quadriруя соотношение (189.3). Мы имеем

$$\kappa^2 = \left(i \sum_{\mu} k_{\mu} \gamma_{\mu} \right)^2 = - \sum_{\mu} \sum_{\nu} k_{\mu} k_{\nu} \gamma_{\mu} \gamma_{\nu}. \quad (189.5)$$

Последнее соотношение будет идентично соотношению (189.4) в том и только в том случае, если в двойной сумме отличны от нуля лишь одни должным образом нормированные диагональные члены, а именно если

$$\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}. \quad (189.6)$$

Применяя аналогичную процедуру непосредственно к уравнению Дирака (189.1) и не используя плоских волн, получаем соотношение вида

$$\kappa^2 \psi = \left(\sum_\mu \gamma_\mu \partial_\mu \right)^2 \psi = \sum_\mu \sum_\nu \gamma_\mu \gamma_\nu \partial_\mu \partial_\nu \psi;$$

последнее с учетом значений антикоммутирующих (189.6) переходит в уравнение Клейна—Фока:

$$\square^2 \psi - \kappa^2 \psi = 0. \quad (189.7)$$

Для величин γ_μ можно построить неприводимые представления в виде четырехрядных матриц. Если γ_μ —одно из таких представлений, то всякое унитарное преобразование $U^\dagger \gamma_\mu U$ порождает некоторое другое неприводимое представление. По этой причине одну из матриц, скажем γ_4 , всегда можно предполагать диагональной. Так как $\gamma_4^2 = 1$, то собственные значения этой матрицы должны быть равны $+1$ и -1 . Таким образом, конструируя набор матриц γ_μ , можно написать

$$\gamma_k = \begin{pmatrix} A_k & B_k \\ C_k & D_k \end{pmatrix}, \quad k = 1, 2, 3; \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (189.8)$$

где все полужирные буквы означают двухрядные матрицы. Далее с помощью соотношений (189.6) находим

$$\gamma_i \gamma_k + \gamma_k \gamma_i = \begin{pmatrix} B_i C_k + B_k C_i & 0 \\ 0 & C_i B_k + C_k B_i \end{pmatrix} = 2\delta_{ik}, \quad (189.9a)$$

$$\gamma_k \gamma_4 + \gamma_4 \gamma_k = \begin{pmatrix} 2A_k & 0 \\ 0 & -2D_k \end{pmatrix} = 0. \quad (189.9b)$$

Для первых трех матриц γ_μ из соотношения (189.9b) получаем

$$A_k = 0, \quad D_k = 0,$$

а из соотношения (189.9a) следует

$$B_k C_k = 1; \quad B_i C_k + C_k B_i = 0. \quad (189.10)$$

Перестановочные соотношения, полученные для рассматриваемых двухрядных матриц, позволяют выразить их через матрицы Паули σ_k (см. задачу 129). Если a и b —обычные числа, то соотно-

шениям (189.10) будут удовлетворять матрицы вида

$$B_k = a\sigma_k, \quad C_k = b\sigma_k, \quad ab = 1. \quad (189.11)$$

Таким образом, всякое представление типа

$$\gamma_k = \begin{pmatrix} 0 & b^{-1}\sigma_k \\ b\sigma_k & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (189.12)$$

обязано удовлетворять перестановочным соотношениям (189.6). *Стандартное представление*, часто используемое в дальнейших задачах, получается отсюда при $b = i$ и имеет вид

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \gamma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \gamma_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \gamma_4 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (189.13)$$

Замечание. Если положить $b = a = 1$, то вместо трех матриц γ_k мы получим матрицы

$$\alpha_k = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0 \end{pmatrix} \quad (189.14)$$

они вместе с матрицей $\gamma_4 \equiv \beta$ удовлетворяют тем же самым перестановочным соотношениям. Два указанных набора матриц связаны между собой соотношениями

$$\gamma_k = -i\beta\alpha_k, \quad \gamma_4 = \beta. \quad (189.15)$$

Матрицы α используются в дираковском гамильтониане (см. задачу 200).

Задача 190. Плоские волны Дирака с положительной энергией

Для случая положительной энергии найти в стандартном представлении спинорные амплитуды дираковских плоских волн, отвечающие как положительной, так и отрицательной спиральности.

Решение. Полагая

$$\psi = C e^{i(k \cdot r - \omega t)} \quad (190.1)$$

и пользуясь стандартным представлением (189.13), для определения четырех компонент амплитуды C получаем систему урав-

нений

$$\begin{aligned}
 (k_x - ik_y) C_4 + k_z C_3 + \left(-\frac{\omega}{c} + \kappa\right) C_1 &= 0, \\
 (k_x + ik_y) C_3 - k_z C_4 + \left(-\frac{\omega}{c} + \kappa\right) C_2 &= 0, \\
 -(k_x - ik_y) C_2 - k_z C_1 + \left(\frac{\omega}{c} + \kappa\right) C_3 &= 0, \\
 -(k_x + ik_y) C_1 + k_z C_2 + \left(\frac{\omega}{c} + \kappa\right) C_4 &= 0.
 \end{aligned} \tag{190.2}$$

С помощью соотношений

$$k\eta = \frac{\omega}{c} - \kappa, \quad \frac{k}{\eta} = \frac{\omega}{c} + \kappa \tag{190.3}$$

введем далее параметр η , через который удобно выражаются важнейшие физические величины, характеризующие движение частицы. Например, импульс частицы, ее кинетическая энергия и ее скорость соответственно имеют вид

$$p = \hbar k = mc \frac{2\eta}{1 - \eta^2}, \tag{190.4a}$$

$$E = \hbar\omega = mc^2 \frac{1 + \eta^2}{1 - \eta^2}, \tag{190.4б}$$

$$v = c \frac{2\eta}{1 + \eta^2}. \tag{190.4в}$$

Кроме того, полезно ввести сферические углы ϑ и φ , характеризующие направление вектора \mathbf{k} :

$$k_x \pm ik_y = k \sin \vartheta e^{\pm i\varphi}, \quad k_z = k \cos \vartheta. \tag{190.5}$$

В новых обозначениях система уравнений (190.2) запишется в виде

$$\begin{aligned}
 \sin \vartheta e^{-i\varphi} C_4 + \cos \vartheta C_3 - \eta C_1 &= 0, \\
 \sin \vartheta e^{i\varphi} C_3 - \cos \vartheta C_4 - \eta C_2 &= 0, \\
 -\sin \vartheta e^{-i\varphi} C_2 - \cos \vartheta C_1 + \frac{1}{\eta} C_3 &= 0, \\
 -\sin \vartheta e^{i\varphi} C_1 + \cos \vartheta C_2 + \frac{1}{\eta} C_4 &= 0.
 \end{aligned} \tag{190.6}$$

Таким образом, для определения четырех величин C_μ мы имеем систему четырех линейных однородных уравнений. Как нетрудно убедиться, определитель этой системы обращается в нуль, однако при этом он распадается на два сомножителя, каждый из которых по отдельности равен нулю. Отсюда следует, что все четыре величины C_μ невозможно выразить через какую-нибудь одну из них — две любые величины C_μ могут быть выбраны произвольным образом. Чтобы сделать этот выбор однозначным, мы воспользуемся следующим методом.

Прежде всего найдем собственные функции оператора спиральности

$$\mathbf{h} = \frac{1}{k} \sum_i \sigma_i k_i; \quad (190.7)$$

он представляет собой оператор „проекции спина на направление вектора \mathbf{k} “. Так как в стандартном представлении спиновые матрицы выражаются через одноименные двухрядные матрицы Паули s_j в виде

$$\sigma_j = \begin{pmatrix} s_j & 0 \\ 0 & s_j \end{pmatrix},$$

то в силу определения (190.7) получаем

$$\mathbf{h} = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & \sin \vartheta e^{-i\varphi} & 0 & 0 \\ \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\cos \vartheta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \vartheta & \sin \vartheta e^{-i\varphi} \\ 0 & 0 & \sin \vartheta e^{i\varphi} & -\cos \vartheta \end{pmatrix}. \quad (190.8)$$

Обозначим собственное значение оператора спиральности через h , тогда уравнение для собственных значений

$$hC = hC$$

разобьется на пару уравнений, связывающих величины C_1 и C_2 :

$$\begin{aligned} C_1 \cos \vartheta + C_2 \sin \vartheta e^{-i\varphi} &= hC_1, \\ C_1 \sin \vartheta e^{i\varphi} - C_2 \cos \vartheta &= hC_2, \end{aligned} \quad (190.9)$$

и такую же пару уравнений, связывающих величины C_3 и C_4 . Определитель системы (190.9) обращается в нуль при условии $h = \pm 1$, поэтому мы имеем два решения.

1) $h = +1$ (спин параллелен вектору \mathbf{k}):

$$C_2 = \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} C_1, \quad C_4 = \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} C_3 \quad (190.10)$$

и

2) $h = -1$ (спин антипараллелен вектору \mathbf{k}):

$$C_2 = -\operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} C_1, \quad C_4 = -\operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2} e^{i\varphi} C_3. \quad (190.11)$$

Что касается величин C_1 и C_3 , то их выбор все еще произволен.

Подставим найденные результаты в систему уравнений (190.6). С учетом элементарных тождеств

$$\begin{aligned} \sin \vartheta \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2} + \cos \vartheta &= 1, & \sin \vartheta \operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2} - \cos \vartheta &= 1, \\ \sin \vartheta - \cos \vartheta \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2} &= \operatorname{tg} \frac{\vartheta}{2}, & \sin \vartheta + \cos \vartheta \operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2} &= \operatorname{ctg} \frac{\vartheta}{2} \end{aligned}$$

из (190.6) получаем

$$C_3 = \eta \bar{C}_1 \quad \text{при } h = +1 \quad (190.12)$$

и

$$C_3 = -\eta \bar{C}_1 \quad \text{при } h = -1. \quad (190.13)$$

Если теперь воспользоваться условием нормировки¹⁾

$$\int_V \psi^\dagger \psi d^3x = \int_V C^\dagger C d^3x = 1, \quad (190.14)$$

то спинорные амплитуды примут вид

$$C_+ = \frac{1}{\sqrt{V(1+\eta^2)}} \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-\frac{i}{2}\varphi} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{\frac{i}{2}\varphi} \\ \eta \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-\frac{i}{2}\varphi} \\ \eta \sin \frac{\vartheta}{2} e^{\frac{i}{2}\varphi} \end{pmatrix} \quad \text{при } h = +1, \quad (190.15)$$

и

$$C_- = \frac{1}{\sqrt{V(1+\eta^2)}} \begin{pmatrix} \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-\frac{i}{2}\varphi} \\ -\cos \frac{\vartheta}{2} e^{\frac{i}{2}\varphi} \\ -\eta \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-\frac{i}{2}\varphi} \\ \eta \cos \frac{\vartheta}{2} e^{\frac{i}{2}\varphi} \end{pmatrix} \quad \text{при } h = -1. \quad (190.16)$$

Замечание. Как следует из соотношения (190.4в), нерелятивистский случай получается при $\eta \ll 1$. Если выполнено указанное неравенство, то компонентами ψ_3 и ψ_4 спинора можно пренебречь и вернуться тем самым к двухкомпонентной теории спина Паули.

¹⁾ Следует подчеркнуть, что условие нормировки лоренц-инвариантно, поскольку фигурирующий в нем интеграл пропорционален полному электрическому заряду, заключенному в объеме V . Часто используется и другая лоренц-инвариантная нормировка: $\bar{\psi}\psi = 1$.

Задача 191. Трансформационные свойства дираковских спиноров

Выяснить, как преобразуется спинор ψ при бесконечно малых преобразованиях Лоренца.

Решение. Бесконечно малое преобразование Лоренца записывается в виде

$$x'_\mu = x_\mu + \sum_{\rho} \epsilon_{\mu\rho} x_\rho, \quad \epsilon_{\mu\rho} = -\epsilon_{\rho\mu}, \quad |\epsilon_{\mu\rho}| \ll 1, \quad (191.1)$$

причем компоненты ϵ_{kl} — действительные величины, а компоненты ϵ_{k4} — чисто мнимые. Уравнение Дирака

$$\sum_{\mu} \gamma_{\mu} D_{\mu} \psi + \kappa \psi = 0 \quad (191.2)$$

в результате этого преобразования принимает вид

$$\sum_{\mu} \gamma_{\mu} D'_{\mu} \psi' + \kappa \psi' = 0, \quad (191.2a)$$

причем коэффициенты γ_{μ} и κ остаются неизменными. Операторы D_{μ} являются компонентами 4-вектора и преобразуются по тому же самому закону (191.1), что и координаты:

$$D'_{\mu} = D_{\mu} + \sum_{\rho} \epsilon_{\mu\rho} D_{\rho}. \quad (191.3)$$

Закон преобразования волновой функции ψ можно записать в виде

$$\psi' = (1 + \xi) \psi, \quad (191.4)$$

где бесконечно малая величина ξ линейна по $\epsilon_{\mu\rho}$ и представляет собой некоторое клиффордово число.

Рассмотрим уравнение (191.2a) и подставим туда вместо D'_{μ} и ψ' соответственно выражения (191.3) и (191.4):

$$\sum_{\mu} \gamma_{\mu} \left(D_{\mu} + \sum_{\rho} \epsilon_{\mu\rho} D_{\rho} \right) (1 + \xi) \psi + (1 + \xi) \kappa \psi = 0.$$

Если умножить полученное уравнение почленно слева на величину $(1 - \xi)$, то последнее слагаемое станет равным $\kappa\psi$, т. е. перейдет в последнее слагаемое уравнения (191.2). Следовательно, оператор ξ мы должны выбрать таким образом, чтобы выполнялось равенство

$$\sum_{\mu} (1 - \xi) \gamma_{\mu} \left(D_{\mu} + \sum_{\rho} \epsilon_{\mu\rho} D_{\rho} \right) (1 + \xi) \psi = \sum_{\mu} \gamma_{\mu} D_{\mu} \psi. \quad (191.5)$$

Пренебрегая всеми величинами второго порядка малости, находим

$$\sum_{\mu} (\gamma_{\mu} \xi - \xi \gamma_{\mu}) D_{\mu} \psi + \sum_{\mu} \sum_{\rho} \epsilon_{\mu\rho} \gamma_{\mu} D_{\rho} \psi = 0.$$

Меняя далее в двойной сумме немые индексы μ и ρ друг на друга и обозначая затем индекс ρ через ν , получаем

$$\sum_{\mu} \left\{ (\gamma_{\mu} \xi - \xi \gamma_{\mu}) - \sum_{\nu} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_{\nu} \right\} D_{\mu} \psi = 0.$$

Так как предполагается, что это соотношение должно иметь место при произвольном ψ , то в нуль должен обращаться каждый член суммы по μ в отдельности:

$$\gamma_{\mu} \xi - \xi \gamma_{\mu} = \sum_{\nu} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_{\nu}. \quad (191.6)$$

Единственное клиффордово число, линейное относительно величин $\varepsilon_{\mu\nu}$ и удовлетворяющее всем этим четырем соотношениям, имеет вид

$$\xi = \frac{1}{4} \sum_{\rho} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\rho\sigma} \gamma_{\rho} \gamma_{\sigma}. \quad (191.7)$$

В этом нетрудно убедиться путем непосредственного вычисления перестановочных соотношений (191.6). Мы имеем

$$\gamma_{\mu} \xi - \xi \gamma_{\mu} = \frac{1}{4} \sum_{\rho} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\rho\sigma} (\gamma_{\mu} \gamma_{\rho} \gamma_{\sigma} - \gamma_{\rho} \gamma_{\sigma} \gamma_{\mu}).$$

Учитывая далее, что

$$\gamma_{\rho} \gamma_{\sigma} \gamma_{\mu} = \gamma_{\rho} (-\gamma_{\mu} \gamma_{\sigma} + 2\delta_{\mu\sigma}) = (\gamma_{\mu} \gamma_{\rho} - 2\delta_{\mu\rho}) \gamma_{\sigma} + 2\gamma_{\rho} \delta_{\mu\sigma}$$

и что, следовательно,

$$\gamma_{\mu} \gamma_{\rho} \gamma_{\sigma} - \gamma_{\rho} \gamma_{\sigma} \gamma_{\mu} = 2(\gamma_{\sigma} \delta_{\mu\rho} - \gamma_{\rho} \delta_{\mu\sigma}),$$

получаем

$$\begin{aligned} \gamma_{\mu} \xi - \xi \gamma_{\mu} &= \frac{1}{2} \sum_{\rho} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\rho\sigma} (\gamma_{\sigma} \delta_{\mu\rho} - \gamma_{\rho} \delta_{\mu\sigma}) = \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_{\sigma} \xi_{\mu\sigma} \gamma_{\sigma} - \sum_{\rho} \varepsilon_{\rho\mu} \gamma_{\rho} \right) = \sum_{\nu} \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_{\nu}, \end{aligned}$$

т. е. справедливость формулы (191.7) доказана.

Таким образом, дираковский спинор ψ преобразуется по закону

$$\psi' = \psi + \frac{1}{4} \sum_{\rho} \sum_{\sigma} \varepsilon_{\rho\sigma} \gamma_{\rho} \gamma_{\sigma} \psi. \quad (191.8)$$

Задача 192. Лоренцевы коварианты

Пусть Γ — один из 16 базисных элементов клиффордовой алгебры. Выяснить, какие можно построить лоренцевы коварианты вида

$$G = \bar{\psi} \Gamma \psi, \quad \bar{\psi} = \psi^{\dagger} \gamma_4. \quad (192.1)$$

Решение. 16 базисных элементов рассматриваемой алгебры можно разбить на пять групп:

1. 1;
2. $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3, \gamma_4$;
3. $\gamma_1\gamma_2, \gamma_1\gamma_3, \gamma_1\gamma_4, \gamma_2\gamma_3, \gamma_2\gamma_4, \gamma_3\gamma_4$;
4. $\gamma_2\gamma_3\gamma_4, \gamma_3\gamma_4\gamma_1, \gamma_4\gamma_1\gamma_2, \gamma_1\gamma_2\gamma_3$;
5. $\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4$.

(192.2)

Ниже для каждой из этих групп в отдельности мы будем конструировать билинейные формы вида (192.1).

Прежде чем приступить к выполнению намеченной программы, исследуем трансформационные свойства какой-нибудь одной из величин (192.1) относительно бесконечно малого преобразования Лоренца

$$x'_\mu = x_\mu + \sum_\rho \varepsilon_{\mu\rho} x_\rho. \quad (192.3)$$

В предыдущей задаче было показано, что закон преобразования волновой функции ψ имеет вид

$$\psi' = (1 + \xi) \psi, \quad (192.4a)$$

где

$$\begin{aligned} \xi &= \frac{1}{4} \sum_\rho \sum_\sigma \varepsilon_{\rho\sigma} \gamma_\rho \gamma_\sigma, \\ \gamma_\mu \xi - \xi \gamma_\mu &= \sum_\nu \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\nu. \end{aligned} \quad (192.4b)$$

Величина G преобразуется по закону

$$G' = \psi'^\dagger \gamma_4 \Gamma \psi' = \psi^\dagger (1 + \xi^\dagger) \gamma_4 \Gamma (1 + \xi) \psi,$$

поэтому формально можно написать

$$G' = \bar{\psi} \Gamma' \psi, \quad \Gamma' = \gamma_4 (1 + \xi^\dagger) \gamma_4 \Gamma (1 + \xi). \quad (192.5)$$

Последнее выражение допускает дальнейшие упрощения, однако для этого надо более детально познакомиться со свойствами эрмитово сопряженного оператора ξ^\dagger . Согласно соотношению (192.4b), этот оператор должен удовлетворять перестановочному соотношению вида

$$\xi^\dagger \gamma_4 - \gamma_4 \xi^\dagger = \sum_k \varepsilon_{4k}^* \gamma_k,$$

так как $\gamma_\nu^\dagger = \gamma_\nu$. Далее, углы поворота ε_{4k} — чисто мнимые величины, поэтому $\varepsilon_{4k}^* = -\varepsilon_{4k}$ и, следовательно,

$$\gamma_4 \xi^\dagger - \xi^\dagger \gamma_4 = \sum_k \varepsilon_{4k} \gamma_k.$$

Таким образом, имеем

$$\gamma_4 \xi^\dagger \gamma_4 = \gamma_4 \{ \gamma_4 \xi^\dagger - \sum_k \varepsilon_{4k} \gamma_k \} = \xi^\dagger - \sum_k \varepsilon_{4k} \gamma_k \gamma_4. \quad (192.6)$$

Кроме того, из соотношения (192.46) при $\varepsilon_{kl}^* = \varepsilon_{kl}$ (действительные вращения в 3-мерном пространстве) вытекает

$$\xi = \frac{1}{4} \sum_k \sum_l \varepsilon_{kl} \gamma_k \gamma_l + \frac{1}{2} \sum_k \varepsilon_{k4} \gamma_k \gamma_4, \quad (192.7a)$$

и, следовательно, эрмитово сопряженный оператор ξ^\dagger можно записать в виде

$$\xi^\dagger = -\frac{1}{4} \sum_k \sum_l \varepsilon_{kl} \gamma_k \gamma_l + \frac{1}{2} \sum_k \varepsilon_{k4} \gamma_k \gamma_4. \quad (192.76)$$

Из двух последних соотношений получаем

$$\xi + \xi^\dagger = \sum_k \varepsilon_{k4} \gamma_k \gamma_4. \quad (192.8)$$

Подставляя теперь выражение (192.8) в формулу (192.6), находим

$$\gamma_4 \xi^\dagger \gamma_4 = -\xi. \quad (192.9)$$

Последний результат позволяет записать „преобразованный оператор“ Γ' , определенный равенством (192.5), в виде

$$\Gamma' = \Gamma + (\Gamma \xi - \xi \Gamma). \quad (192.10)$$

Теперь нетрудно применить это простое соотношение к выводу трансформационных свойств каждой из пяти групп величин (192.2).

1. Для $\Gamma = 1$ из соотношения (192.10) сразу же получаем, что $\Gamma' = 1$, поэтому

$$G = \bar{\psi} \psi \rightarrow G' = \bar{\psi} \psi; \quad G' = G \quad (192.11)$$

и, следовательно, величина G в данном случае ведет себя как скаляр.

2. Для $\Gamma = \gamma_\mu$ соотношения (192.10) и (192.46) дают

$$\Gamma' = \gamma_\mu + \sum_\nu \varepsilon_{\mu\nu} \gamma_\nu,$$

поэтому закон преобразования теперь имеет вид

$$G_\mu = \bar{\psi} \gamma_\mu \psi \rightarrow G'_\mu = G_\mu + \sum_\nu \varepsilon_{\mu\nu} G_\nu \quad (192.12)$$

и, следовательно, величины G_μ преобразуются как компоненты вектора.

3. При рассмотрении третьей группы величин удобно сначала разбить каждое произведение $\gamma_\mu \gamma_\nu$ на симметричную и антисимметричную части:

$$\gamma_\mu \gamma_\nu = \frac{1}{2} (\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu) + \frac{1}{2} (\gamma_\mu \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\mu).$$

Первая часть последнего выражения сводится к дельта-функции Кронекера $\delta_{\mu\nu}$, т. е. представляет собой скаляр (192.11), умноженный на единичный тензор. Новые трансформационные свойства могут оказаться лишь у второй антисимметричной части, поэтому ниже мы ограничимся рассмотрением выражения

$$\sigma_{\mu\nu} = \frac{1}{2} (\gamma_\mu \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\mu). \quad (192.13)$$

Согласно соотношению (192.46), имеем

$$\xi \gamma_\mu \gamma_\nu = \left(\gamma_\mu \xi - \sum_\rho \varepsilon_{\mu\rho} \gamma_\rho \right) \gamma_\nu = \gamma_\mu \left(\gamma_\nu \xi - \sum_\rho \varepsilon_{\nu\rho} \gamma_\rho \right) - \sum_\rho \varepsilon_{\mu\rho} \gamma_\rho \gamma_\nu,$$

или

$$\gamma_\mu \gamma_\nu \xi - \xi \gamma_\mu \gamma_\nu = \sum_\rho (\varepsilon_{\nu\rho} \gamma_\mu \gamma_\rho + \varepsilon_{\mu\rho} \gamma_\rho \gamma_\nu),$$

поэтому закон преобразования теперь гласит:

$$G_{\mu\nu} = \bar{\psi} \sigma_{\mu\nu} \psi \rightarrow G'_{\mu\nu} = G_{\mu\nu} + \sum_\rho (\varepsilon_{\mu\rho} G_{\rho\nu} + \varepsilon_{\nu\rho} G_{\mu\rho}), \quad (192.14)$$

т. е. величины $G_{\mu\nu}$ ведут себя при бесконечно малых вращениях как компоненты *тензора* второго ранга.

4. Произведения трех величин γ можно записать в более удобном виде, если ввести клиффордово число γ_5 , определив его равенством

$$\gamma_5 = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4. \quad (192.15)$$

Мы имеем

$$\begin{aligned} \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4 &= \gamma_1 \gamma_5, & \gamma_4 \gamma_1 \gamma_2 &= \gamma_3 \gamma_5, \\ -\gamma_3 \gamma_4 \gamma_1 &= \gamma_2 \gamma_5, & -\gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 &= \gamma_4 \gamma_5. \end{aligned}$$

Так как величина γ_5 антикоммутирует со всеми четырьмя величинами γ_μ ,

$$\gamma_\mu \gamma_5 + \gamma_5 \gamma_\mu = 0, \quad (192.16)$$

то она должна коммутировать с величиной ξ , поэтому, применяя соотношение (192.10) к выражению $\Gamma = \gamma_\mu \gamma_5$, получаем

$$\Gamma' = \gamma_\mu \gamma_5 + (\gamma_\mu \gamma_5 \xi - \xi \gamma_\mu \gamma_5) = [\gamma_\mu + (\gamma_\mu \xi - \xi \gamma_\mu)] \gamma_5.$$

Таким образом, мы вновь возвращаемся к случаю 2, так что

и теперь величины G_μ преобразуются как компоненты вектора:

$$G_\mu = \bar{\Psi} \gamma_\mu \gamma_5 \Psi \rightarrow G'_\mu = G_\mu + \sum_\nu \varepsilon_{\mu\nu} G_\nu. \quad (192.17)$$

Точнее говоря, рассматриваемая величина представляет собой не вектор (полярный), а *псевдовектор*. Смотрите в этой связи следующую задачу.

5. В этом случае из соотношений (192.15) и (192.16) следует

$$G = \bar{\Psi} \gamma_5 \Psi \rightarrow G' = G, \quad (192.18)$$

и мы заключаем, что величина G преобразуется как скаляр. В следующей задаче будет показано, что величину G точнее было бы назвать *псевдоскаляром*.

Задача 193. Пространственная инверсия

Выяснить, как ведут себя лоренц-ковариантные величины, рассмотренные в предыдущей задаче, при инверсии пространственных координат (преобразование четности).

Решение. Прежде всего выясним, как ведет себя при пространственной инверсии спинор ψ . По определению при пространственной инверсии,

$$x'_k = -x_k, \quad x'_4 = x_4, \quad (193.1)$$

уравнение Дирака

$$\sum_\mu \gamma_\mu D_\mu \psi + \kappa \psi = 0 \quad (193.2)$$

переходит в уравнение

$$\sum_\mu \gamma_\mu D'_\mu \psi' + \kappa \psi' = 0. \quad (193.2a)$$

Операторы ∂_μ так же преобразуются по закону (193.1). Более подробный анализ требуется в случае, когда имеется электромагнитное поле. Компоненты напряженности электрического поля \mathcal{E}_k связаны с компонентами 4-вектора потенциала A_μ соотношениями

$$\mathcal{E}_k = -\frac{1}{c} \dot{A}_k - \partial_k \Phi = -i(\partial_4 A_k - \partial_k A_4).$$

Так как напряженность электрического поля представляет собой полярный 3-вектор, то она при рассматриваемом преобразовании координат x_k меняет свой знак. Отсюда следует

$$A'_k = -A_k, \quad A'_4 = A_4. \quad (193.3)$$

Таким образом, величины A_μ преобразуются так же, как операторы ∂_μ . По этой причине по тому же самому закону преоб-

разуются и операторы D_μ . Следовательно, уравнение (193.2a) можно переписать в виде

$$-\sum_k \gamma_k D_k \psi' + \gamma_4 D_4 \psi' + \kappa \psi' = 0.$$

Если теперь положить

$$\psi' = \gamma_4 \psi, \quad (193.4)$$

то легко видеть, что последнее уравнение переходит в уравнение (193.2), поэтому равенство (193.4) представляет собой искомый закон преобразования спинора ψ при пространственной инверсии.

Что касается любой из величин

$$G = \bar{\psi} \Gamma \psi = \psi^\dagger \gamma_4 \Gamma \psi,$$

то их закон преобразования гласит:

$$G' = \psi'^\dagger \gamma_4 \Gamma \psi' = \psi^\dagger \Gamma \gamma_4 \psi = \bar{\psi} \gamma_4 \Gamma \gamma_4 \psi,$$

и, следовательно, можно написать

$$G = \bar{\psi} \Gamma \psi \rightarrow G' = \bar{\psi} \Gamma' \psi, \quad \Gamma' = \gamma_4 \Gamma \gamma_4. \quad (193.5)$$

Применим полученные результаты к каждой из пяти лоренц-ковариантных величин, введенных в предыдущей задаче. Мы имеем

$$1. \quad G = \bar{\psi} \psi, \quad \Gamma = 1, \quad \Gamma' = 1, \quad G' = G, \quad (193.6)$$

$$5. \quad G = \bar{\psi} \gamma_5 \psi, \quad \Gamma = \gamma_5, \quad \Gamma' = \gamma_4 \gamma_5 \gamma_4 = -\gamma_5, \quad G' = -G. \quad (193.7)$$

Обе рассматриваемые величины одинаковым образом ведут себя при пространственных вращениях, но при пространственной инверсии их поведение различно. В этой связи величину 1 называют *скаляром*, а величину 5 — *псевдоскаляром*. Далее мы имеем

$$2. \quad \begin{aligned} G_\mu &= \bar{\psi} \gamma_\mu \psi, & \Gamma &= \gamma_\mu, \\ \Gamma'_k &= \gamma_4 \gamma_k \gamma_4 = -\gamma_k, \\ G'_k &= -G_k, \\ \Gamma'_4 &= \gamma_4, & G'_4 &= +G_4. \end{aligned} \quad (193.8)$$

$$4. \quad \begin{aligned} G_\mu &= \bar{\psi} \gamma_\mu \gamma_5 \psi, & \Gamma &= \gamma_\mu \gamma_5, \\ \Gamma'_k &= \gamma_4 \gamma_k \gamma_5 \gamma_4 = +\gamma_k \gamma_5, & G'_k &= +G_k, \\ \Gamma'_4 &= \gamma_5 \gamma_4 = -\gamma_4 \gamma_5, & G'_4 &= -G_4. \end{aligned} \quad (193.9)$$

Эти две величины также ведут себя при пространственных вращениях совершенно одинаково, но при пространственной инверсии их поведение различно, по этой причине величину 2 назы-

вают (полярным) вектором, а величину 4 — аксиальным вектором, или псевдовектором.

$$\begin{aligned}
 3. \quad G_{\mu\nu} &= \bar{\psi} \sigma_{\mu\nu} \psi, & \Gamma &= \frac{1}{2} (\gamma_\mu \gamma_\nu - \gamma_\nu \gamma_\mu), \\
 \Gamma'_{kl} &= \Gamma_{kl}, & G'_{kl} &= G_{kl}, \\
 \Gamma'_{k4} &= -\Gamma_{k4}, & G'_{k4} &= -G_{k4}.
 \end{aligned} \tag{193.10}$$

Так как в рассматриваемой теории имеется всего один тензор, то необходимость в дальнейшей классификации отпадает.

Задача 194. Зарядовое сопряжение

Зная спинор ψ , являющийся решением уравнения Дирака для частицы с зарядом e , построить зарядово сопряженный спинор ψ_c , описывающий поведение частицы с зарядом противоположного знака $-e$.

Решение. В этой задаче ради краткости мы будем пользоваться обозначением

$$a_\mu = \frac{e}{\hbar c} A_\mu,$$

где A_μ — компоненты 4-потенциала электромагнитного поля. В этих обозначениях уравнение Дирака для частицы с зарядом e имеет вид

$$\sum_\mu \gamma_\mu (\partial_\mu - ia_\mu) \psi + \kappa \psi = 0. \tag{194.1}$$

Спинор ψ_c , описывающий поведение частицы с зарядом противоположного знака, должен удовлетворять уравнению

$$\sum_\mu \gamma_\mu (\partial_\mu + ia_\mu) \psi_c + \kappa \psi_c = 0. \tag{194.2}$$

Наша задача — установить связь между решением ψ_c уравнения (194.2) и решением ψ уравнения (194.1).

Прежде всего заметим, что оператор $\partial_\mu + ia_\mu$, фигурирующий в уравнении (194.2), появляется также и в уравнении

$$\sum_\mu (\partial_\mu + ia_\mu) \bar{\psi} \gamma_\mu - \kappa \bar{\psi} = 0, \quad \bar{\psi} = \psi^+ \gamma_4, \tag{194.3}$$

которое представляет собой уравнение, сопряженное исходному уравнению (194.1). Производя в этом уравнении операцию транспонирования, находим

$$\sum_\mu \tilde{\gamma}_\mu (\partial_\mu + ia_\mu) \tilde{\bar{\psi}} - \kappa \tilde{\bar{\psi}} = 0,$$

где

$$\hat{\bar{\psi}} = \tilde{\gamma}_4 \psi^*. \quad (194.4)$$

Умножим последнее уравнение на некоторое клиффордово число C :

$$\sum_{\mu} C \tilde{\gamma}_{\mu} (\partial_{\mu} + i a_{\mu}) \tilde{\gamma}_4 \psi^* - \kappa C \tilde{\gamma}_4 \psi^* = 0.$$

Полученное таким образом уравнение будет тождественно уравнению (194.2), если клиффордово число C одновременно удовлетворяет двум соотношениям

$$-C \tilde{\gamma}_{\mu} \tilde{\gamma}_4 \psi^* = \gamma_{\mu} \psi_c, \quad C \tilde{\gamma}_4 \psi^* = \psi_c. \quad (194.5)$$

Чтобы найти величину C , исключим из этих соотношений спинор ψ_c :

$$-C \tilde{\gamma}_{\mu} \tilde{\gamma}_4 \psi^* = \gamma_{\mu} C \tilde{\gamma}_4 \psi^*.$$

Так как далее спинор $\tilde{\gamma}_4 \psi^*$ следует считать произвольным, то должны выполняться соотношения

$$\gamma_{\mu} C = -C \tilde{\gamma}_{\mu}; \quad (194.6)$$

из них и определяется величина C .

Поскольку мы имеем дело с однородными уравнениями, то в спиноре ψ_c всегда содержится произвольный постоянный множитель. Разумно зафиксировать этот множитель, постулируя, что зарядовое сопряжение не приводит к изменению нормировки:

$$\psi_c^{\dagger} \psi_c = \psi^{\dagger} \psi = (\psi^{\dagger} \psi)^*. \quad (194.7)$$

Теперь в силу соотношений (194.5) имеем

$$\psi_c^{\dagger} = \tilde{\psi} \gamma_4^* C^{\dagger}$$

и, следовательно,

$$\psi_c^{\dagger} \psi_c = \tilde{\psi} \gamma_4^* C^{\dagger} C \tilde{\gamma}_4 \psi^* = (\psi^*)^{\dagger} (\gamma_4^* C^{\dagger} C \tilde{\gamma}_4) (\psi^*).$$

Последнее соотношение идентично соотношению (194.7), если

$$\gamma_4^* C^{\dagger} C \tilde{\gamma}_4 = 1$$

или (поскольку $\gamma_4^{\dagger} = \gamma_4$, $\tilde{\gamma}_4 = \gamma_4^*$) соотношению

$$C^{\dagger} C = 1. \quad (194.8)$$

Таким образом, C — унитарный оператор.

Заметим, что в стандартном представлении

$$\begin{aligned}\tilde{\gamma}_1 &= -\gamma_1, & \tilde{\gamma}_2 &= \gamma_2, \\ \tilde{\gamma}_3 &= -\gamma_3, & \tilde{\gamma}_4 &= \gamma_4.\end{aligned}\quad (194.9)$$

поэтому из соотношений (194.6) следует, что C коммутирует с γ_1 и γ_3 и антикоммутирует с γ_2 и γ_4 . Такими свойствами обладает клиффордово число

$$C = \gamma_2\gamma_4, \quad (194.10)$$

которое и является единственным элементом из всех 16 базисных элементов клиффордовой алгебры, удовлетворяющим четырем соотношениям (194.6). Как следует из (194.10)

$$C^\dagger = -C, \quad C^2 = -1, \quad (194.11)$$

поэтому, согласно (194.5), зарядово сопряженная волновая функция в стандартном представлении имеет вид

$$\psi_c = \gamma_3\psi^*. \quad (194.12)$$

Задача 195. Состояния со смешанной спиральностью

Дана дираковская плоская волна, распространяющаяся вдоль оси z . Показать, что спинорную амплитуду невозможно выбрать таким образом, чтобы волновая функция ψ была одновременно собственной функцией оператора σ_x .

Решение

а. Как следует из уравнения Дирака, в случае плоской волны

$$\psi = Ce^{i(kz - \omega t)}, \quad (195.1)$$

должно выполняться алгебраическое соотношение

$$\Omega C \equiv \left(ik\gamma_3 - \frac{\omega}{c} \gamma_4 + \kappa \right) C = 0, \quad (195.2)$$

где C — спинорная амплитуда. Оператор Ω , определенный соотношением (195.2), не коммутирует с оператором

$$\sigma_x = -i\gamma_2\gamma_3, \quad (195.3)$$

так как

$$\sigma_x \Omega = k\gamma_2 + i \frac{\omega}{c} \gamma_2\gamma_3\gamma_4 - i\kappa\gamma_2\gamma_3,$$

но

$$\Omega \sigma_x = -k\gamma_2 + i \frac{\omega}{c} \gamma_2\gamma_3\gamma_4 - i\kappa\gamma_2\gamma_3.$$

Следовательно, функция ψ не может быть общей собственной функцией обоих указанных операторов¹⁾.

б. В стандартном представлении соотношение (195.2), если его расписать по компонентам, дает

$$\begin{aligned} kC_3 + \left(-\frac{\omega}{c} + \kappa\right) C_1 &= 0, \\ -kC_4 + \left(-\frac{\omega}{c} + \kappa\right) C_2 &= 0, \\ -kC_1 + \left(\frac{\omega}{c} + \kappa\right) C_3 &= 0, \\ kC_2 + \left(\frac{\omega}{c} + \kappa\right) C_4 &= 0. \end{aligned} \quad (195.2a)$$

Отсюда, вводя обозначения

$$\frac{\omega}{c} - \kappa = k\eta, \quad \frac{\omega}{c} + \kappa = \frac{k}{\eta}, \quad (195.3a)$$

получаем

$$C_3 = \eta C_1, \quad C_4 = -\eta C_2. \quad (195.4)$$

С другой стороны, задача на собственные значения

$$\sigma_x C = \lambda \cdot C, \quad (195.5)$$

где λ — собственное значение, если перейти к компонентной записи

$$\sigma_x C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_2 \\ C_1 \\ C_4 \\ C_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda C_1 \\ \lambda C_2 \\ \lambda C_3 \\ \lambda C_4 \end{pmatrix},$$

дает

$$C_2 = \lambda C_1, \quad C_1 = \lambda C_2 \quad (195.6a)$$

и

$$C_4 = \lambda C_3, \quad C_3 = \lambda C_4. \quad (195.6b)$$

Обе пары уравнений удовлетворяются только в том случае, если $\lambda = \pm 1$. Пользуясь далее уравнениями (195.6), можно исключить компоненты C_2 и C_4 из уравнений (195.4). В результате получаем два соотношения

$$C_3 = \eta C_1 \quad \text{и} \quad \lambda C_3 = -\eta \lambda C_1,$$

¹⁾ В общем случае такой вывод неправилен, так как соответствующая теорема утверждает лишь, что у некоммутирующих операторов нет *общей системы* собственных функций, хотя отдельные общие собственные функции вполне могут быть. — *Прим. ред.*

которые противоречат одно другому. Следовательно, спинор C , удовлетворяющий уравнениям (195.4), не может одновременно удовлетворять уравнениям (195.6).

Замечание. В нерелятивистском пределе ($\eta \rightarrow 0$) компоненты C_3 и C_4 , а вместе с ними и вторая пара уравнений (195.6) выпадают из рассмотрения, и противоречие устраняется.

Задача 196. Среднее значение спина

Вычислить среднее значение оператора σ_x в состоянии, которое описывается суперпозицией двух плоских волн, распространяющихся в направлении оси z и имеющих противоположные спиральности.

Решение. С помощью спинорных амплитуд [см. выражения (190.15) и (190.16), в которых в данном случае необходимо положить $\vartheta = 0$]

$$C_+ = \frac{1}{\sqrt{V(1+\eta^2)}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \eta \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad C_- = \frac{1}{\sqrt{V(1+\eta^2)}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \\ \eta \end{pmatrix}, \quad (196.1)$$

отвечающих соответственно положительной и отрицательной спиральностям, мы сконструируем амплитуду смешанного состояния

$$C = C_+ \cos \alpha e^{i\beta} + C_- \sin \alpha e^{-i\beta}, \quad (196.2)$$

удовлетворяющую прежнему условию нормировки

$$\int C^\dagger C d^3x = 1. \quad (196.3)$$

Выше α и β — произвольные действительные постоянные. Среднее значение оператора σ_x определяется по формуле

$$\langle \sigma_x \rangle = \int C^\dagger \sigma_x C d^3x. \quad (196.4)$$

Учитывая, что

$$\sqrt{V(1+\eta^2)} \sigma_x C_+ = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \eta \end{pmatrix}, \quad \sqrt{V(1+\eta^2)} \sigma_x C_- = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ \eta \\ 0 \end{pmatrix},$$

получаем

$$\begin{aligned} C_+^\dagger \sigma_x C_+ &= 0, & C_-^\dagger \sigma_x C_+ &= -\frac{1}{V} \frac{1-\eta^2}{1+\eta^2}, \\ C_+^\dagger \sigma_x C_- &= -\frac{1}{V} \frac{1-\eta^2}{1+\eta^2}, & C_-^\dagger \sigma_x C_- &= 0. \end{aligned}$$

Отсюда имеем

$$\langle \sigma_x \rangle = -\cos \alpha \sin \alpha (e^{2i\beta} + e^{-2i\beta}) \frac{1-\eta^2}{1+\eta^2},$$

или

$$\langle \sigma_x \rangle = -\sin 2\alpha \cos 2\beta \frac{1-\eta^2}{1+\eta^2}. \quad (196.5)$$

Таким образом, абсолютная величина среднего значения оператора σ_x оказывается всегда меньше 1. В ультрарелятивистском случае, когда параметр η приближается к единице, среднее значение $\langle \sigma_x \rangle$ стремится к нулю, так что волна оказывается почти полностью поляризованной параллельно или антипараллельно направлению распространения¹⁾. С другой стороны, в нерелятивистском случае, когда параметр η очень мал, становится возможной и поляризация в направлении, перпендикулярном направлению распространения волны. Действительно, для значений $\beta = 0$ и $\alpha = \mp \pi/4$ в этом предельном случае получаем $\langle \sigma_x \rangle = \pm 1$.

Задача 197. Алгебраические свойства волнового спинора Дирака

Дираковская частица помещена в поле с потенциалом $V(z)$. Волновой спинор, описывающий состояние частицы, в котором ее спин направлен либо параллельно, либо антипараллельно оси z , можно считать не зависящим от координат x и y (одномерная задача). Рассмотреть движение частицы, пользуясь, насколько это возможно, клиффордовой алгеброй, не обращаясь к конкретным матричным представлениям. Показать, что задача сводится к нахождению четырех функций переменной z , удовлетворяющих некоторой системе дифференциальных уравнений. Выяснить, каким образом упомянутые функции связаны с компонентами волновой функции в стандартном представлении.

Решение. Волновой спинор можно записать в виде

$$\psi(z, t) = e^{-iEt/\hbar} u(z), \quad (197.1)$$

где спинор $u(z)$ удовлетворяет одномерному уравнению Дирака

$$\gamma_3 \frac{du}{dz} + \gamma_4 Q(z) u + \kappa u = 0, \quad Q(z) = \frac{V(z) - E}{\hbar c}. \quad (197.2)$$

Конструкция выражения, стоящего в левой части этого уравнения, такова, что оно целиком содержится в подтеле, базисными элементами которого являются клиффордовы числа $1, \gamma_3, \gamma_4, \gamma_3\gamma_4$,

¹⁾ Более подробный анализ спиновых свойств электрона см., например, в книге: Соколов А. А., Тернов И. М., Релятивистский электрон, изд-во „Наука“, М., 1974, стр. 192—198.— *Прим. ред.*

поэтому решением уравнения должен быть спинор вида

$$v(z) = A(z) + B(z) \gamma_3 + C(z) \gamma_4 + D(z) \gamma_3 \gamma_4. \quad (197.3)$$

Разумеется, если v — решение уравнения Дирака (197.2), то решением будет и любой спинор

$$u = v\Gamma, \quad (197.4)$$

где Γ — произвольное, не зависящее от z клиффордово число, в частности любой элемент клиффордовой алгебры, образованный с помощью базисных элементов γ_1 и γ_2 . Далее, очевидно, что спинор v коммутирует со спиновым оператором

$$\sigma_z = -i\gamma_1\gamma_2, \quad (197.5)$$

хотя и не является собственным спинором этого оператора. Обобщенное выражение (197.4) позволяет сделать решение уравнения Дирака собственным спинором оператора σ_z . Мы имеем

$$\sigma_z u = \sigma_z v \Gamma = v \sigma_z \Gamma.$$

Поэтому, если Γ есть некоторый собственный спинор оператора σ_z ,

$$\sigma_z \Gamma = \pm \Gamma, \quad (197.6)$$

то мы получаем

$$\sigma_z u = \pm u. \quad (197.7)$$

Собственные значения $+1$ и -1 называются *спиральностью* (см. задачу 190). Далее нетрудно убедиться, что

$$\Gamma_+ = 1 - i\gamma_1\gamma_2 = 1 + \sigma_z \quad (197.8a)$$

и

$$\Gamma_- = 1 + i\gamma_1\gamma_2 = 1 - \sigma_z \quad (197.8b)$$

представляют собой собственные спиноры оператора σ_z , принадлежащие соответственно собственным значениям $+1$ и -1 . Действительно,

$$\sigma_z \Gamma_{\pm} = \sigma_z (1 \pm \sigma_z) = \sigma_z \pm 1 = \pm (1 \pm \sigma_z) = \pm \Gamma_{\pm}.$$

Таким образом, имеем

$$u(z) = v(z) (1 \mp i\gamma_1\gamma_2), \quad (197.9)$$

где спинор $v(z)$ еще необходимо определить путем подстановки выражения (197.3) в уравнение Дирака (197.2). Несложные вычисления дают

$$(B' + QC + \kappa A) + \gamma_3 (A' - QD + \kappa B) + \gamma_4 (D' + QA + \kappa C) + \\ + \gamma_3 \gamma_4 (C' - QB + \kappa D) = 0, \quad (197.10)$$

причем выше штрих означает дифференцирование по переменной z . Выражение, фигурирующее в левой части равенства (197.10), обращается в нуль в том и только в том случае, когда обращаются в нуль все четыре выражения, стоящие в круглых скобках.

Отсюда следует, что четыре функции A, B, C, D удовлетворяют системе дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} B' + QC + \kappa A &= 0, & A' - QD + \kappa B &= 0, \\ D' + QA + \kappa C &= 0, & C' - QB + \kappa D &= 0. \end{aligned} \quad (197.11)$$

Комбинируя эти уравнения, можно преобразовать систему к более простому виду:

$$\begin{aligned} (B - D)' + (\kappa - Q)(A - C) &= 0, \\ (A - C)' + (\kappa + Q)(B - D) &= 0 \end{aligned} \quad (197.12a)$$

и

$$\begin{aligned} (B + D)' + (\kappa + Q)(A + C) &= 0, \\ (A + C)' + (\kappa - Q)(B + D) &= 0. \end{aligned} \quad (197.12b)$$

Мы видим, что первая пара уравнений полученной системы содержит лишь две неизвестные функции,

$$\omega_1 = \frac{1}{2}(B - D), \quad \omega_3 = \frac{1}{2}(A - C). \quad (197.13a)$$

Во второй паре уравнений содержатся также только две неизвестные функции

$$\omega_2 = \frac{1}{2}(A + C), \quad \omega_4 = \frac{1}{2}(B + D). \quad (197.13b)$$

Подставляя полученные результаты в выражение (197.3), окончательно находим

$$v(z) = (\omega_2 + \omega_4\gamma_3)(1 + \gamma_4) + (\omega_3 + \omega_1\gamma_3)(1 - \gamma_4). \quad (197.14)$$

Если функции ω_μ удовлетворяют уравнениям (197.12a) и (197.12b), то оба члена, фигурирующие в правой части выражения (197.14), порознь удовлетворяют уравнению Дирака (197.2). Умножая каждый из этих членов справа на Γ_+ или на Γ_- [см. выражения (197.8a) и (197.8b)], получаем решения уравнения Дирака, которые одновременно являются собственными спинорами оператора σ_z .

В заключение остается показать, каким образом функции ω_μ связаны с компонентами u_μ волновой функции в стандартном представлении. Пользуясь стандартным представлением, уравнение Дирака (197.2) можно расписать по компонентам:

$$\begin{aligned} -iu'_3 + (Q + \kappa)u_1 &= 0, \\ iu'_4 + (Q + \kappa)u_2 &= 0, \\ iu'_1 + (\kappa - Q)u_3 &= 0, \\ -iu'_2 + (\kappa - Q)u_4 &= 0. \end{aligned} \quad (197.15)$$

Сравнивая эту систему уравнений с системой уравнений (197.12a) —

(197.126), находим

$$u_1 = \omega_1, \quad u_3 = i\omega_3, \quad u_2 = i\omega_2, \quad u_4 = \omega_4, \quad (197.16)$$

или

$$\begin{aligned} A &= -i(u_2 + u_3), & B &= u_4 + u_1, \\ C &= -i(u_2 - u_3), & D &= u_4 - u_1. \end{aligned} \quad (197.17)$$

В случае $u_2 = u_4 = 0$ спиральность равна $+1$, если же $u_1 = u_3 = 0$, то спиральность равна -1 .

Задача 198. Плотность тока в алгебраической формулировке

Получить выражения для компонент вектора плотности электрического тока в случае состояния, описываемого собственным спином

$$u(z) = (\omega_3 + \omega_1\gamma_3)(1 - \gamma_4)(1 - i\gamma_1\gamma_2), \quad (198.1)$$

найденным в предыдущей задаче.

Решение. Компоненты 4-вектора плотности электрического тока определяются выражениями

$$s_\mu = iec\bar{u}\gamma_\mu u, \quad \bar{u} = u^\dagger \gamma_4. \quad (198.2)$$

В нашем случае

$$u^\dagger = (1 - i\gamma_1\gamma_2)(1 - \gamma_4)(\omega_3^* + \omega_1^*\gamma_3), \quad (198.3)$$

так как клиффордовы числа $i\gamma_1\gamma_2$, γ_4 , γ_3 представляют собой эрмитовы операторы. Таким образом, имеем

$$\begin{aligned} s_\mu &= iec(1 - i\gamma_1\gamma_2)(1 - \gamma_4)(\omega_3^* + \omega_1^*\gamma_3) \times \\ &\times \gamma_4\gamma_\mu(\omega_3 + \omega_1\gamma_3)(1 - \gamma_4)(1 - i\gamma_1\gamma_2). \end{aligned} \quad (198.4)$$

Рассматривая компоненты s_1 и s_2 , удобно переместить клиффордово число γ_μ на два места вправо, а клиффордово число γ_4 — на одно место влево:

$$\begin{aligned} s_{1,2} &= iec(1 - i\gamma_1\gamma_2)(\gamma_4 - 1)(\omega_3^* - \omega_1^*\gamma_3) \times \\ &\times (\omega_3 - \omega_1\gamma_3)(1 + \gamma_4)\gamma_{1,2}(1 - i\gamma_1\gamma_2). \end{aligned}$$

Оператор $1 - i\gamma_1\gamma_2$ коммутирует как с оператором γ_3 , так и с оператором γ_4 , поэтому

$$\begin{aligned} s_{1,2} &= iec(\gamma_4 - 1)\{(|\omega_3|^2 + |\omega_1|^2) - (\omega_1^*\omega_3 + \omega_3^*\omega_1)\gamma_3\}(1 + \gamma_4) \times \\ &\times (1 - i\gamma_1\gamma_2)\gamma_{1,2}(1 - i\gamma_1\gamma_2). \end{aligned}$$

Для компоненты с $\mu = 1$ произведение трех последних множителей записывается в виде

$$(1 - i\gamma_1\gamma_2)(\gamma_1 - i\gamma_2) = \gamma_1 + i\gamma_2 - i\gamma_2 - \gamma_1 = 0.$$

Аналогично для компоненты с $\mu = 2$ имеем

$$(1 - i\gamma_1\gamma_2)(\gamma_2 + i\gamma_1) = \gamma_2 - i\gamma_1 + i\gamma_1 - \gamma_2 = 0.$$

Таким образом, как и следовало ожидать, компоненты плотности тока, перпендикулярные оси z , оказываются равными нулю.

Выполняя такие же преобразования для компоненты s_3 , получаем

$$s_3 = iec(\gamma_4 - 1)(\omega_3^* - \omega_1^*\gamma_3)(\omega_3\gamma_3 + \omega_1)(1 - \gamma_4)(1 - i\gamma_1\gamma_2)^2.$$

Так как

$$(1 - i\gamma_1\gamma_2)^2 = 2(1 - i\gamma_1\gamma_2), \quad (198.5)$$

то выражение для s_3 принимает вид

$$s_3 = 2iec(\gamma_4 - 1)\{(\omega_3^*\omega_1 - \omega_1^*\omega_3) + (|\omega_3|^2 - |\omega_1|^2)\gamma_3\}(1 - \gamma_4)(1 - i\gamma_1\gamma_2).$$

Перемещая здесь первый множитель $(\gamma_4 - 1)$ на одно место вправо, получаем

$$s_3 = 2iec\{(\omega_1^*\omega_3 - \omega_3^*\omega_1)(1 - \gamma_4) + (|\omega_1|^2 - |\omega_3|^2)\gamma_3(\Gamma + \gamma_4)\} \times \\ \times (1 - \gamma_4)(1 - i\gamma_1\gamma_2).$$

В силу соотношений

$$(1 + \gamma_4)(1 - \gamma_4) = 0, \quad (1 - \gamma_4)^2 = 2(1 - \gamma_4) \quad (198.6)$$

второй член из фигурных скобок не дает вклада в рассматриваемую компоненту, поэтому окончательно

$$s_3 = 4iec(\omega_1^*\omega_3 - \omega_3^*\omega_1)(1 - \gamma_4)(1 - i\gamma_1\gamma_2). \quad (198.7)$$

В случае компоненты s_4 совершенно аналогичные выкладки дают

$$s_4 = iec(1 - i\gamma_1\gamma_2)(1 - \gamma_4)(\omega_3^* + \omega_1^*\gamma_3)(\omega_3 + \omega_1\gamma_3)(1 - \gamma_4)(1 - i\gamma_1\gamma_2) = \\ = 2iec(1 - \gamma_4)\{(|\omega_1|^2 + |\omega_3|^2) + (\omega_1^*\omega_3 + \omega_3^*\omega_1)\gamma_3\}(1 - \gamma_4)(1 - i\gamma_1\gamma_2) = \\ = 4iec(|\omega_1|^2 + |\omega_3|^2)(1 - \gamma_4)(1 - i\gamma_1\gamma_2). \quad (198.8)$$

Выражения для компонент s_3 и s_4 представляют собой клиффордовы числа одинаковой структуры. Чтобы выяснять их физический смысл, мы должны сравнить найденные выражения с нормой спинора

$$\bar{u}u = (1 - i\gamma_1\gamma_2)(1 - \gamma_4)(\omega_3^* + \omega_1^*\gamma_3)\gamma_4(\omega_3 + \omega_1\gamma_3)(1 - \gamma_4)(1 - i\gamma_1\gamma_2),$$

которую с помощью тех же преобразований можно записать в виде

$$\bar{u}u = 4(|\omega_1|^2 - |\omega_3|^2)(1 - \gamma_4)(1 - i\gamma_1\gamma_2). \quad (198.9)$$

Собирая вместе полученные результаты, видим, что компонента s_3 плотности тока в направлении оси z , плотность заряда $\rho(s_4 = ic\rho)$

и, наконец, норма, если отвлечься от общего множителя

$$\Gamma = 4(1 - \gamma_4)(1 - i\gamma_1\gamma_2),$$

определяются очень простыми c -числовыми выражениями:

$$s_3 = iec(\omega_1^*\omega_3 - \omega_3^*\omega_1)\Gamma, \quad (198.10)$$

$$\rho = e(|\omega_1|^2 + |\omega_3|^2)\Gamma \quad (198.11)$$

и

$$\bar{u}u = (|\omega_1|^2 - |\omega_3|^2)\Gamma. \quad (198.12)$$

Как было показано в предыдущей задаче, в стандартном представлении $u_1 = \omega_1$ и $u_3 = i\omega_3$, поэтому найденные выражения можно записать по-иному:

$$s_3 = ec(u_1^*u_3 + u_3^*u_1)\Gamma, \quad (198.13)$$

$$\rho = e(|u_1|^2 + |u_3|^2)\Gamma,$$

$$\bar{u}u = (|u_1|^2 - |u_3|^2)\Gamma.$$

Заметим, что в стандартном представлении оператор Γ имеет очень простой вид. Мы имеем

$$1 - \gamma_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \quad 1 - i\gamma_1\gamma_2 = 1 + \sigma_3 = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

и, следовательно,

$$\Gamma = 16 \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (198.14)$$

т. е. Γ представляет собой диагональную матрицу с единственным отличным от нуля элементом.

Задача 199. Ток проводимости и ток поляризации

а) Показать, что плотность тока частицы с зарядом e ,

$$s_\nu = iec\bar{\psi}\gamma_\nu\psi; \quad s_k = j_k; \quad s_4 = ic\rho, \quad (199.1)$$

удовлетворяет уравнению непрерывности

$$\sum_\mu \frac{\partial s_\mu}{\partial x_\mu} = 0 \quad \text{или} \quad \text{div} \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (199.2)$$

б) Показать, что вектор s_ν можно разбить на две части:

$$s_\nu = s_\nu^C + s_\nu^P, \quad (199.3)$$

причем пространственные компоненты *тока проводимости* s_v^C совпадают по форме с компонентами плотности тока j_k в нерелятивистской теории. Вторая часть плотности тока s_k^P известна под названием *тока поляризации*.

Решение

а. Чтобы убедиться в справедливости уравнения (199.2), мы должны в дополнение к уравнению Дирака

$$\sum_{\mu} \gamma_{\mu} (\partial_{\mu} - ia_{\mu}) \psi + \kappa \psi = 0,$$

где

$$\partial_{\mu} = \frac{\partial}{\partial x_{\mu}}, \quad a_{\mu} = \frac{e}{c\hbar} A_{\mu}, \quad (199.4a)$$

рассмотреть аналогичное дифференциальное уравнение для функции $\bar{\psi} = \psi^{\dagger} \gamma_4$. Так как величины x_k и a_k — действительные, а величины x_4 и a_4 — чисто мнимые, то операторы, комплексно сопряженные операторам

$$D_k = \partial_k - ia_k, \quad D_4 = \partial_4 - ia_4,$$

имеют вид

$$D_k^* = \partial_k + ia_k, \quad D_4^* = -(\partial_4 + ia_4).$$

Запишем уравнение, сопряженное уравнению (199.4a):

$$\sum_{\mu} D_{\mu}^* \psi^{\dagger} \gamma_{\mu} + \kappa \psi^{\dagger} = 0.$$

После подстановки $\bar{\psi} = \psi^{\dagger} \gamma_4$ оно принимает вид

$$-\sum_k D_k^* \bar{\psi} \gamma_k + D_4^* \bar{\psi} \gamma_4 + \kappa \bar{\psi} = 0,$$

так что окончательно имеем

$$\sum_{\mu} (\partial_{\mu} + ia_{\mu}) \bar{\psi} \gamma_{\mu} - \kappa \bar{\psi} = 0. \quad (199.4b)$$

Исключая из уравнений (199.4a) и (199.4b) массовые члены, получаем

$$\sum_{\mu} \{ \bar{\psi} \gamma_{\mu} (\partial_{\mu} - ia_{\mu}) \psi + (\partial_{\mu} + ia_{\mu}) \bar{\psi} \gamma_{\mu} \cdot \psi \} = 0.$$

Члены, содержащие 4-вектор потенциала a_{μ} , взаимно сокращаются, и мы имеем

$$\sum_{\mu} \partial_{\mu} (\bar{\psi} \gamma_{\mu} \psi) = 0,$$

что полностью согласуется с уравнением непрерывности (199.2).

б. Как было показано в задаче 126, нерелятивистская плотность тока определяется выражением

$$j_k = \frac{ie\hbar}{2m} (\psi \partial_k \psi^* - \psi^* \partial_k \psi + 2ia_k \psi^* \psi) \quad (199.5)$$

и, следовательно, содержит билинейные комбинации волновых функций и их пространственных производных. Чтобы придать плотности тока s_ν , определенной выражением (199.1), аналогичную форму, мы должны либо выразить с помощью уравнения (199.4а) функцию ψ через ее первые производные, либо с помощью уравнения (199.4б) сделать то же самое для функции $\bar{\psi}$. Поступая указанным образом, получаем

$$s_\nu = \frac{iec}{\chi} \sum_\mu (\partial_\mu + ia_\mu) \bar{\psi} \gamma_\mu \cdot \gamma_\nu \psi = -\frac{iec}{\chi} \bar{\psi} \gamma_\nu \sum_\mu \gamma_\mu (\partial_\mu - ia_\mu) \psi.$$

Беря полусумму приведенных выражений и учитывая, что

$$\frac{ec}{\chi} = \frac{e\hbar}{m},$$

запишем плотность тока в более симметричном виде:

$$s_\nu = \frac{ie\hbar}{2m} \sum_\mu \left\{ \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x_\mu} \gamma_\mu \gamma_\nu \psi - \bar{\psi} \gamma_\nu \gamma_\mu \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} + ia_\mu \bar{\psi} (\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu) \psi \right\}. \quad (199.6)$$

Пользуясь далее для преобразования второго и третьего членов перестановочным соотношением

$$\gamma_\mu \gamma_\nu + \gamma_\nu \gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu},$$

получаем

$$s_\nu = \frac{ie\hbar}{2m} \left\{ \sum_\mu \left(\frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x_\mu} \gamma_\mu \gamma_\nu \psi + \bar{\psi} \gamma_\mu \gamma_\nu \frac{\partial \psi}{\partial x_\mu} \right) - 2\bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x_\nu} + 2ia_\nu \bar{\psi} \psi \right\}.$$

Если в последнем выражении выделить диагональный член суммы, то оно запишется в виде

$$s_\nu = \frac{ie\hbar}{2m} \left\{ \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x_\nu} \psi - \bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x_\nu} + 2ia_\nu \bar{\psi} \psi \right\} + \frac{ie\hbar}{2m} \sum_\mu' \frac{\partial}{\partial x_\mu} (\bar{\psi} \gamma_\mu \gamma_\nu \psi). \quad (199.7)$$

В этом окончательном результате первый член по форме в точности совпадает с нерелятивистским выражением (199.5) и в согласии с нашим определением его можно отождествить с током проводимости s_ν^C . Второй же член представляет собой так называемый ток поляризации

$$s_\nu^P = \frac{ie\hbar}{2m} \sum_{\mu \neq \nu} \frac{\partial}{\partial x_\mu} (\bar{\psi} \gamma_\mu \gamma_\nu \psi). \quad (199.8)$$

Замечание. Это разложение плотности тока впервые было исследовано в работе Гордона [Gordon W., Zs. Phys., 50, 630 (1928)]. Пространственную часть плотности тока поляризации S_k^P можно записать в виде

$$s^P = \frac{e}{m} \operatorname{rot} (\bar{\psi} \mathbf{S} \psi) - \frac{e\hbar i}{2mc} \frac{\partial}{\partial t} (\bar{\psi} \boldsymbol{\alpha} \psi),$$

где

$$S_k = \frac{\hbar}{2} \sigma_k$$

— компоненты вектора спина, записанные с помощью приводимых четырехрядных матриц, а α_k — матрицы, определенные в конце задачи 189. В случае плоской волны ток поляризации обращается в нуль.

Задача 200. Уравнение Дирака в двухкомпонентной записи

Записать уравнение Дирака в гамильтоновой форме и, пользуясь стандартным представлением, расщепить четырехкомпонентное уравнение на пару двухкомпонентных уравнений, содержащих матрицы Паули. Показать, что частица с равной нулю массой покоя (например, нейтрино) допускает описание в рамках двухкомпонентной теории.

Решение. Если в уравнении Дирака

$$\sum_{\mu} \gamma_{\mu} D_{\mu} \psi + \kappa \psi = 0, \quad D_{\mu} = \partial_{\mu} - \frac{ie}{\hbar c} A_{\mu}, \quad (200.1)$$

$$A_4 = i\Phi, \quad e\Phi = V, \quad \partial_4 = -\frac{i}{c} \partial_t$$

явным образом выделить производную по времени, то его можно записать в виде

$$\sum_{n=1}^3 \gamma_n D_n \psi + \gamma_4 \left(-\frac{i}{c} \partial_t + \frac{V}{\hbar c} \right) \psi + \kappa \psi = 0.$$

Умножая это уравнение слева на $c\hbar \gamma_4$, получаем

$$\hbar c \sum_n \gamma_4 \gamma_n D_n \psi - i\hbar \partial_t \psi + V \psi + mc^2 \gamma_4 \psi = 0,$$

или

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi,$$

где оператор

$$H = \hbar c \sum_{n=1}^3 \gamma_4 \gamma_n \left(\partial_n - \frac{ie}{\hbar c} A_n \right) + V + mc^2 \gamma_4, \quad (200.2)$$

можно рассматривать в качестве гамильтониана.

В стандартном представлении

$$\gamma_n = \begin{pmatrix} 0' & -is_n \\ is_n & 0' \end{pmatrix}, \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1' & 0' \\ 0' & -1' \end{pmatrix}. \quad (200.3)$$

Здесь s_n — матрицы Паули, а $1'$ и $0'$ — единичная и нулевая двухрядные матрицы соответственно. Далее имеем

$$\alpha_n = i\gamma_4\gamma_n = \begin{pmatrix} 0' & s_n \\ s_n & 0' \end{pmatrix}, \quad (200.4)$$

поэтому гамильтониан (200.2) можно записать в расщепленной форме

$$H = \begin{pmatrix} V + mc^2 & -\hbar ci \sum_n s_n D_n \\ -\hbar ci \sum_n s_n D_n & V - mc^2 \end{pmatrix}. \quad (200.5)$$

Если ввести двухкомпонентные функции ψ_a и ψ_b , связанные с четырехкомпонентным дираковским спинором соотношением

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix},$$

то уравнение Дирака расщепится на пару двухкомпонентных уравнений:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi_a}{\partial t} &= -i\hbar c (\mathbf{s} \cdot \mathbf{D}) \psi_b + (V + mc^2) \psi_a, \\ -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi_b}{\partial t} &= -i\hbar c (\mathbf{s} \cdot \mathbf{D}) \psi_a + (V - mc^2) \psi_b. \end{aligned} \quad (200.6)$$

В частности, в случае стационарных состояний с положительной энергией E получаем

$$\begin{aligned} (\mathbf{s} \cdot \mathbf{D}) \psi_b - i \frac{E - V - mc^2}{\hbar c} \psi_a &= 0, \\ (\mathbf{s} \cdot \mathbf{D}) \psi_a - i \frac{E - V + mc^2}{\hbar c} \psi_b &= 0. \end{aligned} \quad (200.7)$$

Теория нейтрино. Если $m = 0$, то вышеприведенные уравнения совпадают между собой, поэтому

$$\psi_b = \lambda \psi_a \quad \text{и} \quad \lambda = \pm 1, \quad (200.8)$$

а два линейно независимых решения ψ_a должны определяться из уравнения

$$\left\{ (\mathbf{s} \cdot \mathbf{D}) - \lambda i \frac{E - V}{\hbar c} \right\} \psi_a = 0. \quad (200.9)$$

Так как эти две системы никак не связаны, то в случае частиц с равной нулю массой покоя имеются две независимые двухкомпонентные теории. Нетрудно показать, что в отсутствие внешних сил параметр λ совпадает с квантовым числом, используемым для характеристики спиральности. Чтобы в этом убедиться, рассмотрим плоскую волну, распространяющуюся вдоль оси z :

$$\psi_a = C e^{ikz},$$

где C — постоянный двухкомпонентный спинор. В этом случае первый член в левой части уравнения (200.9) приобретает вид

$$s_3 \partial_3 \psi_a = ik (s_3 \psi_a),$$

в то время как второй член будет равен

$$-\lambda i \frac{E}{\hbar c} \psi_a = -ik \lambda \psi_a,$$

и, следовательно,

$$s_3 C = \lambda C. \quad (200.10)$$

Таким образом, λ есть собственное значение компоненты оператора спина (в единицах $\hbar/2$) в направлении распространения волны („спиральность”). Так как матрица Паули s_3 диагональна,

$$s_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

то при $\lambda = 1$ решением уравнения (200.10) является спинор

$$C = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

поэтому

$$\psi = \begin{pmatrix} C \\ C \end{pmatrix} e^{ikz}. \quad (200.11a)$$

В случае же отрицательной спиральности $\lambda = -1$ решением упомянутого уравнения является спинор

$$C' = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

и поэтому

$$\psi = \begin{pmatrix} C' \\ -C' \end{pmatrix} e^{ikz}. \quad (200.11b)$$

Замечание. Как показали эксперименты, спиральность нейтрино всегда отрицательна, т. е. $h = -1$, поэтому только второй вариант развитой выше теории правильно описывает фактически происходящие явления природы.

Рассмотрим в этой связи оператор

$$\gamma_5 = \gamma_1 \gamma_2 \gamma_3 \gamma_4,$$

который в стандартном представлении имеет вид

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 0' & -1' \\ -1' & 0' \end{pmatrix}.$$

Далее имеем

$$1 + \gamma_5 = \begin{pmatrix} 1' & -1' \\ -1' & 1' \end{pmatrix}, \quad 1 - \gamma_5 = \begin{pmatrix} 1' & 1' \\ 1' & 1' \end{pmatrix}.$$

Если подействовать этими операторами на любое решение уравнения (200.9) с $\lambda = +1$, т. е. на решение вида

$$\psi_+ = \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_a \end{pmatrix},$$

то получим

$$(1 + \gamma_5) \psi_+ = 0, \quad (1 - \gamma_5) \psi_+ = 2\psi_+. \quad (200.12a)$$

Действие же этих операторов на решения уравнения (200.9) с $\lambda = -1$, т. е. на решения вида

$$\psi_- = \begin{pmatrix} \psi_a \\ -\psi_a \end{pmatrix},$$

дает

$$(1 + \gamma_5) \psi_- = 2\psi_-, \quad (1 - \gamma_5) \psi_- = 0. \quad (200.12b)$$

В силу полученных результатов мы не можем решить, реализуются ли в природе по каким-то неизвестным причинам только одни состояния ψ_- или же оператор взаимодействия, ответственный за рождение нейтрино, содержит множитель $(1 + \gamma_5)$, так что рождение нейтрино с $\lambda = 1$ становится невозможным. В заключение надо отметить, что оператор $(1 + \gamma_5)$ не коммутирует с оператором пространственной инверсии, и в таких взаимодействиях пространственная четность не сохраняется.

Задача 201. Центральные силы в теории Дирака

Дираковская частица помещена в сферически симметричное поле $V(r)$. Воспользовавшись тем, что в стандартном представлении уравнение Дирака расщепляется на пару двухкомпонентных уравнений (задача 200), найти собственные спиноры дираковского гамильтониана, которые одновременно являются общими собственными спинорами операторов J^2 и J_z . При расчетах можно ограничиться случаем $m_j = +1/2$.

Решение. Согласно (200.7), уравнение Дирака, записанное в расщепленной форме, имеет вид

$$\sum_{n=1}^3 s_n \partial_n \psi_b - i \frac{E - V(r) - mc^2}{\hbar c} \psi_a = 0, \quad (201.1)$$

$$\sum_{n=1}^3 s_n \partial_n \psi_a - i \frac{E - V(r) + mc^2}{\hbar c} \psi_b = 0,$$

где s_n ($n = 1, 2, 3$) — матрицы Паули, а двухкомпонентные спиноры ψ_a и ψ_b связаны с дираковским спинором соотношением

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix}. \quad (201.2)$$

В стандартном представлении операторы компонент полного момента, определенного соотношением

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma},$$

действуя на дираковский спинор, не смешивают две его первые компоненты ψ_a с двумя другими его компонентами ψ_b . Это связано с тем, что в стандартном представлении спиновые четырехрядные матрицы, записанные через матрицы Паули, имеют диагональную форму

$$\sigma_n = \begin{pmatrix} s_n & 0 \\ 0 & s_n \end{pmatrix}.$$

Таким образом, если двухкомпонентные спиноры ψ_a и ψ_b являются собственными спинорами операторов J^2 и J_z , то этим же свойством будет обладать и 4-спинор ψ , определенный соотношением (201.2).

Ранее, в задаче 133, нами были найдены двухкомпонентные собственные спиноры $u_{j, l}$ операторов J^2 и J_z , принадлежащие собственным значениям $j = l \pm 1/2$ и $m_j = +1/2$:

$$\begin{aligned} u^I &= u_{j, j-1/2} = \frac{f_l(r)}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+1} & Y_{l,0} \\ -\sqrt{l} & Y_{l,1} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{f_{j-1/2}(r)}{\sqrt{2j}} \begin{pmatrix} \sqrt{j+1/2} & Y_{j-1/2,0} \\ -\sqrt{j-1/2} & Y_{j-1/2,1} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (201.3a)$$

и

$$\begin{aligned} u^{II} &= u_{j, j+1/2} = \frac{g_l(r)}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l} & Y_{l,0} \\ \sqrt{l+1} & Y_{l,1} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{g_{j+1/2}(r)}{\sqrt{2(j+1)}} \begin{pmatrix} \sqrt{j+1/2} & Y_{j+1/2,0} \\ \sqrt{j+3/2} & Y_{j+1/2,1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (201.3b)$$

Попытаемся найти решение нашей задачи, комбинируя спиноры двух указанных типов:

$$\psi = \begin{pmatrix} u^I \\ u^{II} \end{pmatrix} \quad (201.4a)$$

и

$$\Psi = \begin{pmatrix} u^{\text{II}} \\ u^{\text{I}} \end{pmatrix}. \quad (201.46)$$

Вопрос о нормировке радиальных функций $f(r)$ и $g(r)$, которая может быть различной для решений (201.4а) и (201.4б), пока оставим открытым.

Чтобы выполнить намеченную программу, необходимо, согласно (202.1), рассмотреть выражение

$$Su^{\text{I, II}} = \sum_{n=1}^3 s_n \partial_n u^{\text{I, II}} = \begin{pmatrix} \partial_z & \partial_x - i\partial_y \\ \partial_x + i\partial_y & -\partial_z \end{pmatrix} u^{\text{I, II}}. \quad (201.5)$$

Пользуясь известными формулами

$$\begin{aligned} \pm(\partial_x \pm i\partial_y)(F(r)Y_{l,m}) &= \sqrt{\frac{(l \pm m + 2)(l \pm m + 1)}{(2l+3)(2l+1)}} \times \\ &\times \left(F' - \frac{l}{r}F\right) Y_{l+1, m \pm 1} - \sqrt{\frac{(l \mp m)(l \mp m - 1)}{(2l+1)(2l-1)}} \times \\ &\times \left(F' + \frac{l+1}{r}F\right) Y_{l-1, m \pm 1} \end{aligned} \quad (201.6a)$$

и

$$\begin{aligned} \partial_z(F(r)Y_{l,m}) &= \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+3)(2l+1)}} \times \\ &\times \left(F' - \frac{l}{r}F\right) Y_{l+1, m} + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} \left(F' + \frac{l+1}{r}F\right) Y_{l-1, m}, \end{aligned} \quad (201.6b)$$

после несколько утомительных, но вполне элементарных преобразований выражений

$$Su^{\text{I}} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+1} \partial_z(f_l Y_{l,0}) - \sqrt{l} (\partial_x - i\partial_y)(f_l Y_{l,1}) \\ \sqrt{l+1} (\partial_x + i\partial_y)(f_l Y_{l,0}) + \sqrt{l} \partial_z(f_l Y_{l,1}) \end{pmatrix}$$

и

$$Su^{\text{II}} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l} \partial_z(g_l Y_{l,0}) + \sqrt{l+1} (\partial_x - i\partial_y)(g_l Y_{l,1}) \\ \sqrt{l} (\partial_x + i\partial_y)(g_l Y_{l,0}) - \sqrt{l+1} \partial_z(g_l Y_{l,1}) \end{pmatrix}$$

в случае $j = l + 1/2$ получаем

$$\begin{aligned} Su^{\text{I}} &= \frac{1}{\sqrt{2l+3}} \left(f_l - \frac{l}{r}f_l\right) \begin{pmatrix} \sqrt{l+1} Y_{l+1,0} \\ \sqrt{l+2} Y_{l+1,1} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2(j+1)}} \left(f_{j-1/2} - \frac{j-1/2}{r}f_{j-1/2}\right) \begin{pmatrix} \sqrt{j+1/2} Y_{j+1/2,0} \\ \sqrt{j+3/2} Y_{j+1/2,1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (201.7a)$$

Если же $j = l - 1/2$, то результат имеет вид

$$\begin{aligned} Su^{\text{II}} &= \frac{1}{\sqrt{2l-1}} \left(g' + \frac{l+1}{r} g_l \right) \begin{pmatrix} \sqrt{l} & Y_{l-1, 0} \\ -\sqrt{l-1} & Y_{l-1, 1} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2j}} \left(g'_{j+1/2} + \frac{j+3/2}{r} g_{j+1/2} \right) \begin{pmatrix} \sqrt{j+1/2} & Y_{j-1/2, 0} \\ -\sqrt{j-1/2} & Y_{j-1/2, 1} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (201.76)$$

Попытаемся сначала удовлетворить системе уравнений (201.1), подставляя туда выражение (201.4а):

$$\begin{aligned} Su^{\text{II}} - i \frac{E-V-mc^2}{\hbar c} u^{\text{I}} &= 0, \\ Su^{\text{I}} - i \frac{E-V+mc^2}{\hbar c} u^{\text{II}} &= 0. \end{aligned} \quad (201.8)$$

Взяв далее для u^{I} и u^{II} выражения (201.3а) и (201.3б), а для Su^{I} и Su^{II} выражения (201.7а) и (201.7б) и подставив в левые части уравнений (201.8), получаем (для простоты опускаем индексы у радиальных функций f и g)

$$\begin{aligned} &Su^{\text{II}} - i \frac{E-V-mc^2}{\hbar c} u^{\text{I}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2j}} \left(g' + \frac{j+3/2}{r} g - i \frac{E-V-mc^2}{\hbar c} f \right) \begin{pmatrix} \sqrt{j+1/2} & Y_{j-1/2, 0} \\ -\sqrt{j-1/2} & Y_{j-1/2, 1} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} &Su^{\text{I}} - i \frac{E-V+mc^2}{\hbar c} u^{\text{II}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2(j+1)}} \left(f' - \frac{j-1/2}{r} f - i \frac{E-V+mc^2}{\hbar c} g \right) \begin{pmatrix} \sqrt{j+1/2} & Y_{j+1/2, 0} \\ \sqrt{j+3/2} & Y_{j+1/2, 1} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Оба выражения обращаются в нуль, если радиальные функции $f(r)$ и $g(r)$ удовлетворяют системе дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} g' + \frac{j+3/2}{r} g - i \frac{E-V(r)-mc^2}{\hbar c} f &= 0, \\ f' - \frac{j-1/2}{r} f - i \frac{E-V(r)+mc^2}{\hbar c} g &= 0. \end{aligned} \quad (201.9а)$$

Для решений второго типа (201.4б) аналогичным путем получают уравнения, которые совпадают по форме с уравнениями (201.8), однако в них на месте спинора u^{I} стоит спинор u^{II} и наоборот, а также в каждом изменен знак перед членом mc^2 на обратный. Таким образом, с помощью тех же выкладок, что и раньше, вместо системы дифференциальных уравнений (201.9а)

получаем систему

$$\begin{aligned} g' + \frac{j+3/2}{r} g - i \frac{E-V(r)+mc^2}{\hbar c} f &= 0, \\ f' - \frac{j-1/2}{r} f - i \frac{E-V(r)-mc^2}{\hbar c} g &= 0. \end{aligned} \quad (201.96)$$

Решая по отдельности системы уравнений (201.9а) и (201.9б), мы для любого заданного потенциала $V(r)$ находим полное решение сформулированной выше задачи. Так как функции f и g определенным образом связаны между собой, то, следовательно, связаны между собой и их относительные нормировки.

Необходимо подчеркнуть, что в отличие от нерелятивистской теории спина компоненты дираковского 4-спинора характеризуются различными значениями l , поэтому в релятивистской теории квантовое число l больше не является хорошим квантовым числом, хотя квантовые числа j и m_j и теперь, разумеется, хорошие квантовые числа.

Задача 202. Проблема Кеплера в теории Дирака

Результаты предыдущей задачи применить в частном случае сферически симметричного потенциала

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (202.1)$$

и найти допустимые значения энергии частицы.

Решение. Как было показано в предыдущей задаче, определение допустимых значений энергии дираковской частицы в общем случае центральных сил сводится к решению систем дифференциальных уравнений (201.9а) и (201.9б), которым обязаны удовлетворять радиальные части волновых функций. Мы начнем с системы (201.9а). Вводя обозначения

$$\beta = \frac{Ze^2}{\hbar c} = \frac{Z}{137} \quad (202.2)$$

(величина β , как правило, мала) и

$$\frac{\mu}{a} = \frac{mc^2 - E}{\hbar c}, \quad \frac{1}{\mu a} = \frac{mc^2 + E}{\hbar c},$$

или

$$\mu = \sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}}, \quad a = \frac{\hbar c}{\sqrt{(mc^2 - E)(mc^2 + E)}}, \quad (202.3)$$

систему дифференциальных уравнений (201.9а) в частном случае

потенциала (202.1) можно записать в виде

$$\begin{aligned} g' + \frac{j+3/2}{r} g + i \left(\frac{\mu}{a} - \frac{\beta}{r} \right) f &= 0, \\ f' - \frac{j-1/2}{r} f - i \left(\frac{1}{\mu a} + \frac{\beta}{r} \right) g &= 0. \end{aligned} \quad (202.4)$$

Решением этой системы мы и займемся.

Прежде всего выясним, как ведут себя функции f и g при очень больших и очень малых значениях r . В пределе $r \rightarrow \infty$ система уравнений (202.4) принимает вид

$$g' + \frac{i\mu}{a} f = 0, \quad f' - \frac{i}{\mu a} g = 0.$$

Нормируемые решения этой системы уравнений имеют форму

$$g = C e^{-r/a}, \quad f = -C \frac{i}{\mu} e^{-r/a}.$$

Что же касается решений, пропорциональных $e^{+r/a}$, то рассматривать их нет необходимости. С другой стороны, в предельном случае $r \rightarrow 0$ регулярные решения, как можно ожидать, имеют вид

$$g = A r^{s-1}, \quad f = B r^{s-1}.$$

Подставляя приведенные выражения в (202.4), получаем

$$\begin{aligned} (s-1)A + \left(j + \frac{3}{2} \right) A - i\beta B &= 0, \\ (s-1)B - \left(j - \frac{1}{2} \right) B - i\beta A &= 0. \end{aligned}$$

Требую обращения в нуль определителя последней системы уравнений, находим

$$s = \sqrt{\left(j + \frac{1}{2} \right)^2 - \beta^2}. \quad (202.5)$$

Комбинируя теперь эти результаты, целесообразно положить

$$\begin{aligned} g &= C r^{s-1} e^{-r/a} G(r), \\ f &= -\frac{i}{\mu} C r^{s-1} e^{-r/a} F(r). \end{aligned} \quad (202.6)$$

Подстановка последних выражений в (202.4) приводит к следующей системе дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} G' + \left(\frac{s + \left(j + \frac{1}{2} \right)}{r} - \frac{1}{a} \right) G + \left(\frac{1}{a} - \frac{\beta}{\mu r} \right) F &= 0, \\ F' + \left(\frac{s - \left(j + \frac{1}{2} \right)}{r} - \frac{1}{a} \right) F + \left(\frac{1}{a} + \frac{\mu\beta}{r} \right) G &= 0. \end{aligned} \quad (202.7)$$

Складывая и вычитая эти уравнения и полагая затем

$$G + F = v(r), \quad G - F = w(r), \quad (202.8)$$

получаем

$$\begin{aligned} v' + \frac{s+p}{r} v &= -(k+q) \frac{w}{r}, \\ w' + \left(\frac{s-p}{r} - \frac{2}{a} \right) w &= -(k-q) \frac{v}{r}, \end{aligned} \quad (202.9)$$

причем выше мы ввели обозначения

$$p = \frac{\beta}{2} \left(\mu - \frac{1}{\mu} \right), \quad q = \frac{\beta}{2} \left(\mu + \frac{1}{\mu} \right), \quad k = j + \frac{1}{2}. \quad (202.10)$$

Согласно первому из уравнений (202.9), имеем

$$\begin{aligned} w &= -\frac{1}{k+q} [rv' + (s+p)v], \\ w' &= -\frac{1}{k+q} [rv'' + (s+p+1)v']. \end{aligned} \quad (202.11)$$

Подставляя эти выражения во второе уравнение системы (202.9), приходим к обыкновенному дифференциальному уравнению второго порядка для функции v :

$$rv'' + \left[(2s+1) - \frac{2}{a}r \right] v' - \frac{2}{a}(s+p)v = 0. \quad (202.12)$$

Уравнение (202.12) — это уравнение Куммера, а его регулярное в нуле, но произвольно нормированное решение представляет собой вырожденную гипергеометрическую функцию

$$v = {}_1F_1 \left(s+p, 2s+1; 2\frac{r}{a} \right). \quad (202.13)$$

Пользуясь далее общей формулой

$$\left(z \frac{d}{dz} + a \right) {}_1F_1(a, c; z) = a {}_1F_1(a+1, c; z),$$

из соотношений (202.11) получаем

$$w = -\frac{s+p}{k+q} {}_1F_1 \left(s+p+1, 2s+1; 2\frac{r}{a} \right). \quad (202.14)$$

Подставляя эти выражения в формулы (202.8), находим функции G и F , а затем с помощью формул (202.6) и радиальные функции g и f :

$$\begin{aligned} g &= \frac{1}{2} Cr^{s-1} e^{-r/a} \left\{ {}_1F_1 \left(s+p, 2s+1; 2\frac{r}{a} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{s+p}{k+q} {}_1F_1 \left(s+p+1, 2s+1; 2\frac{r}{a} \right) \right\}, \\ f &= -\frac{i}{2\mu} Cr^{s-1} e^{-r/a} \left\{ {}_1F_1 \left(s+p, 2s+1; 2\frac{r}{a} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{s+p}{k+q} {}_1F_1 \left(s+p+1, 2s+1; 2\frac{r}{a} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (202.15)$$

Обе фигурирующие здесь вырожденные гипергеометрические функции асимптотически пропорциональны $e^{+2r/a}$, и, следовательно, полученные решения будут ненормируемыми до тех пор, пока первые аргументы вырожденных гипергеометрических функций не равны нулю или же целому отрицательному числу:

$$s + p = -n_r, \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (202.16)$$

Когда $s + p = 0$, первый аргумент второй вырожденной гипергеометрической функции $s + p + 1$ равен $+1$, однако при этой функции имеется множитель $s + p$, так что в рассматриваемом частном случае асимптотически расходящиеся члены из выражений (202.15) попросту выпадут. Таким образом, искомые собственные значения полностью определяются условием (202.16). Подставляя в это условие вместо p и μ соответственно выражения (202.10) и (202.3), получаем для определения допустимых значений энергии E уравнение

$$\frac{1}{2} \beta \left(\sqrt{\frac{mc^2 - E}{mc^2 + E}} - \sqrt{\frac{mc^2 + E}{mc^2 - E}} \right) = -(n_r + s).$$

Отсюда для уровней энергии водородоподобного атома находим формулу

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{1 + \frac{\beta^2}{(n_r + s)^2}}}. \quad (202.17)$$

До сих пор мы еще не рассматривали вторую систему уравнений (201.9б) для определения радиальных волновых функций. Нетрудно убедиться, что в этом случае вместо системы (202.4) у нас получилась бы система уравнений, отличающаяся от (202.4) заменой μ на $-1/\mu$. В результате величины q и p , фигурировавшие выше, заменились бы соответственно на $-q$ и $-p$, а условие для определения собственных значений (202.16) приняло бы вид

$$s - p = -n_r.$$

Все эти изменения, однако, ничего не меняют в формуле для энергетических уровней, поэтому каждый уровень оказывается двукратно вырожденным.

Если $\beta > 1$ ($Z > 137$), то определенный соотношением (202.5) показатель s в случае основного состояния оказывается чисто мнимой величиной и наше решение перестает удовлетворять граничному условию при $r = 0$. Для очень больших значений Z потенциальная яма становится настолько глубокой, что энергия основного состояния E оказывается меньше $-mc^2$. В силу соотношения (202.3) величина a при этом становится чисто мнимой и функции g и f [см. (202.6)] не будут больше экспоненциально убывать на больших расстоя-

ниях r , что физически обусловлено проникновением электронной волны в область отрицательных энергий (парадокс Клейна). Более подробно мы обсудим это явление для случая потенциальной ступеньки в задаче 207 (случай e)¹⁾.

Задача 203. Тонкая структура энергетических уровней атома водорода

Для атома водорода фигурировавший в предыдущей задаче параметр β совпадает с зоммерфельдовской постоянной тонкой структуры

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}.$$

Этот параметр достаточно мал, и для анализа полученных выше результатов можно пользоваться степенными разложениями. С помощью указанных разложений подтвердить нерелятивистскую теорию и найти первые релятивистские поправки к ней.

Решение. Раскладывая по степеням α показатель s , определяемый соотношением (202.5), получаем

$$s = \left(j + \frac{1}{2} \right) - \frac{\alpha^2}{2j+1} + O(\alpha^4). \quad (203.1)$$

Подставляя это разложение в формулу для энергетических уровней (202.17) и вводя главное квантовое число

$$n = n_r + j + \frac{1}{2}, \quad (203.2)$$

находим

$$E = mc^2 \left\{ 1 + \left[\alpha^2 \left/ \left(n - \frac{\alpha^2}{2j+1} \right)^2 \right] \right\}^{-1/2}$$

или

$$E = mc^2 \left\{ 1 - \frac{\alpha^2}{2n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right] + O(\alpha^6) \right\}. \quad (203.3)$$

Так как

$$mc^2 \alpha^2 = \frac{me^4}{\hbar^2},$$

то формула для уровней энергии водорода с учетом первой релятивистской поправки приобретает вид

$$E = mc^2 - \frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right]. \quad (203.4)$$

¹⁾ Согласно квантовой электродинамике, при $Z > 137$ точечный заряд спонтанно рождает позитроны. Более подробно с этим кругом вопросов можно ознакомиться в обзорной статье: Зельдович Я. Б., Попов В. С., УФН, 105, 404 (1971).—Прим. ред.

Здесь первый член представляет собой энергию покоя, второй совпадает с нерелятивистской бальмеровской энергией (см. задачу 67) и, наконец, последний член дает первую релятивистскую поправку, пропорциональную $\alpha^2 = 0,532 \times 10^{-4}$, т. е. составляющую примерно $1/200\%$ энергии связи. Так как эта поправка зависит от обоих квантовых чисел n и j , то каждый нерелятивистский уровень энергии расщепляется на несколько близко расположенных подуровней, о совокупности которых говорят как о тонкой структуре уровней атома водорода.

Рассмотрим теперь степенное разложение параметра a , который определяется соотношением (202.3) и имеет размерность длины. Это разложение записывается в виде

$$a = \frac{\hbar^2}{m e^2} n \left[1 - \frac{\alpha^2}{2n^2} \left(\frac{n}{j+1/2} - 1 \right) \right] + O(\alpha^4) \quad (203.5)$$

Если в выражении, заключенном в квадратные скобки, пренебречь релятивистской поправкой, то в результате получится борковский радиус n -й электронной орбиты атома водорода. Так как отношение $2r/a$ входит в качестве аргумента в вырожденные гипергеометрические функции и так как в выражения (202.15) для радиальных волновых функций входит множитель $e^{-r/a}$, то размеры атома водорода определяются величиной параметра a точно таким же образом, как и в нерелятивистской теории.

Чтобы от релятивистских волновых функций (202.15) перейти к волновым функциям нерелятивистской теории Шредингера, необходимо рассмотреть степенные разложения параметров μ и q , определенных соответственно соотношениями (202.3) и (202.10). Мы имеем

$$\mu = \frac{\alpha}{2n} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{2j+1} - \frac{1}{4} \right) \right], \quad (203.6)$$

$$q = n \left[1 - \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{2j+1} - \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (203.7)$$

В нерелятивистском приближении множитель, стоящий при второй гипергеометрической функции в формулах (202.15), принимает вид

$$\frac{s+p}{k+q} = -\frac{n_r}{j+1/2+n} = -\frac{n_r}{n_r+(2j+1)} \quad (203.8)$$

и, следовательно, по порядку величины равен единице (исключением является случай $n_r = 0$, когда указанный множитель также равен нулю). Так как параметр μ в рассматриваемом приближении в силу (203.6) по порядку величины равен α , то функция f примерно в 100 раз больше функции g . Поэтому в нерелятивистском приближении радиальные волновые функции (нор-

мировка произвольная) определяются соотношениями

$$\begin{aligned}
 g &= 0, \\
 f &= r^{l-1/2} e^{-r/a} \left[{}_1F_1 \left(-n_r, 2j+2; 2\frac{r}{a} \right) - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{n_r}{n_r+2j+1} {}_1F_1 \left(-n_r+1, 2j+2; 2\frac{r}{a} \right) \right]. \quad (203.9)
 \end{aligned}$$

Если теперь в выражении для функции f положить $j=l+1/2$, то оно действительно перейдет в выражение для шредингеровской волновой функции [см. соотношение (67.12)]

$$f_{\text{шр}} = r^l e^{-\gamma r} {}_1F_1(l+1-n, 2l+2; 2\gamma r), \quad (203.9a)$$

где $\gamma=1/a$. В этом можно убедиться следующим образом. С учетом равенства $j=l+1/2$ из определения главного квантового числа (203.2) следует, что $n=n_r+l+1$, поэтому $n_r=n-l-1$ и

$$\begin{aligned}
 f &= r^l e^{-\gamma r} \left\{ {}_1F_1(l+1-n, 2l+3; 2\gamma r) - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{n-l-1}{n+l-1} {}_1F_1(l+2-n, 2l+3; 2\gamma r) \right\}.
 \end{aligned}$$

Воспользуемся теперь общей формулой

$$a {}_1F_1(a+1, c+1; z) = (a-c) {}_1F_1(a, c+1; z) + c {}_1F_1(a, c; z)$$

и, учтя равенства $a=l+1-n$, $c=2l+2$, $z=2\gamma r$, преобразуем с помощью этой формулы выражение, стоящее в фигурных скобках:

$${}_1F_1(a, c+1; z) + \frac{a}{c-a} {}_1F_1(a+1, c+1; z),$$

к виду

$$\frac{c}{c-a} {}_1F_1(a, c; z) = \frac{2l+2}{n+l+1} {}_1F_1(l+1-n, 2l+2; 2\gamma r).$$

Таким образом, выражение (203.9) действительно переходит в выражение (203.9a).

Чтобы получить нерелятивистское приближение для решений второго типа, требуется специальное рассмотрение. В результате замены величины μ величиной $-1/\mu$ функция f становится малой, а функция g — большой, поэтому в нерелятивистском приближении (нормировка опять произвольная) мы должны положить

$$\begin{aligned}
 f &= 0, \\
 g &= r^{l-1/2} e^{-\gamma r} \left\{ {}_1F_1(-n_r, 2j+2; 2\gamma r) - {}_1F_1(1-n_r, 2j+2; 2\gamma r) \right\}. \quad (203.10)
 \end{aligned}$$

Так как в рассматриваемом случае $j=l-1/2$, то теперь имеем

$$g = r^{l-1} e^{-\gamma r} \left\{ {}_1F_1(-n_r, 2l+1; 2\gamma r) - {}_1F_1(1-n_r, 2l+1; 2\gamma r) \right\}.$$

Чтобы убедиться, что последнее выражение совпадает с (203.9a), воспользуемся общими формулами

$$a \{ {}_1F_1(a+1, c-1; z) - {}_1F_1(a, c-1; z) \} = z \frac{d}{dz} {}_1F_1(a, c-1; z)$$

и

$$(c-1) \frac{d}{dz} {}_1F_1(a, c-1; z) = a {}_1F_1(a+1, c; z).$$

С их помощью нетрудно показать, что с точностью до постоянного множителя $2\gamma/(2l+1)$ для функции g получается выражение

$$g = r^l e^{-\gamma r} {}_1F_1(1-n_r, 2l+2; 2\gamma r).$$

Так как, согласно (203.2),

$$1-n_r = j + 3/2 - n$$

и, кроме того,

$$j = l - 1/2,$$

то первый аргумент вырожденной гипергеометрической функции опять оказывается равным $l+1-n$ и, следовательно, полученное выше выражение совпадает с (203.9a).

До сих пор мы рассматривали величину l просто в качестве удобного параметра, не интересуясь его физическим смыслом. Чтобы восполнить этот пробел, вычислим для обоих типов решений среднее значение оператора L^2 . Пользуясь соотношением

$$L^2 Y_{l,m} = \hbar^2 l(l+1) Y_{l,m},$$

нетрудно показать, что в обоих случаях интересующее нас среднее значение описывается формулой

$$\langle L^2 \rangle = \hbar^2 \frac{\int_0^\infty [(j-1/2)(j+1/2)|f|^2 + (j+1/2)(j+3/2)|g|^2] r^2 dr}{\int_0^\infty [|f|^2 + |g|^2] r^2 dr}. \quad (203.11)$$

Для решений первого типа функция $|g|^2$ в α^{-2} раз меньше функции $|f|^2$ и ее можно не учитывать, следовательно, в этом случае

$$\langle L^2 \rangle = (j-1/2)(j+1/2) \hbar^2 \quad (203.12a)$$

и мы имеем $j-1/2 = l$. Для решений второго типа можно пренебречь $|f|^2$ по сравнению с $|g|^2$ и получить

$$\langle L^2 \rangle = (j+1/2)(j+3/2) \hbar^2, \quad (203.12b)$$

и, следовательно, в этом случае $j+1/2 = l$. Именно такими подстановками мы и пользовались в приведенных выше расчетах.

Другими словами, в нерелятивистском приближении, когда функции f и g больше не входят одновременно в один и тот же спинор, l снова становится хорошим квантовым числом.

Дополнение. Как мы показали, собственные спиноры связаны с двухкомпонентными функциями

$$u^I = \frac{1}{\sqrt{2j}} f(r) \begin{pmatrix} \sqrt{j+1/2} Y_{j-1/2,0} \\ -\sqrt{j-1/2} Y_{j-1/2,1} \end{pmatrix}$$

и

$$u^{II} = \frac{1}{\sqrt{2(j+1)}} g(r) \begin{pmatrix} \sqrt{j+1/2} Y_{j+1/2,0} \\ \sqrt{j+3/2} Y_{j+1/2,1} \end{pmatrix}$$

и могут быть двух типов:

$$\psi_a = \begin{pmatrix} u^I \\ u^{II} \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad \psi_b = \begin{pmatrix} u^{II} \\ u^I \end{pmatrix},$$

причем $g \ll f$ для решений ψ_a и $f \ll g$ для решений ψ_b . Приближенно мы, таким образом, имеем

$$\psi_a = \begin{pmatrix} u^I \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \psi_b = \begin{pmatrix} u^{II} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Рассматриваемое приближение соответствует нерелятивистской двухкомпонентной теории спина, в которой $j=l+1/2$ для волновых функций ψ_a и $j=l-1/2$ для волновых функций ψ_b , т. е. при заданном значении квантового числа j волновые функции не содержат сферических гармоник с различными значениями l .

Кроме того, мы показали, что радиальная часть „больших“ компонент спинора ψ_a определяется формулой

$$f = r^{j-1/2} e^{-r/n} {}_1F_1(j+1/2-n, 2j+1; 2\gamma r),$$

где $j=l+1/2$, а радиальная часть „больших“ компонент спинора ψ_b определяется формулой

$$g = r^{j+1/2} e^{-r/n} {}_1F_1(j+3/2-n, 2j+3; 2\gamma r),$$

где $j=l-1/2$. Эти решения нормируемы только в том случае, когда первые аргументы вырожденных гипергеометрических функций равны нулю или целому отрицательному числу. Возможные состояния атома водорода, отвечающие низким значениям полного момента, приведены в следующей таблице:

l	Решение		Спектроскопические обозначения для решений	
	ψ_a	ψ_b	ψ_a	ψ_b
$1/2$	$n \geq 1$	$n \geq 2$	$ns_{1/2}$	$np_{1/2}$
$3/2$	$n \geq 2$	$n \geq 3$	$np_{3/2}$	$nd_{3/2}$
$5/2$	$n \geq 3$	$n \geq 4$	$nd_{5/2}$	$nf_{5/2}$

Соответствующие этим состояниям радиальные волновые функции (либо f , либо g) совпадают с радиальными волновыми функциями нерелятивистской теории, которые подробно рассмотрены в задаче 67. Угловые же части волновых функций являются двухкомпонентными в полном согласии с нерелятивистской теорией спина, разобранный в задаче 133.

Если отбросить энергию покоя, то, согласно соотношению (203.4), уровни энергии описываются формулой

$$E_{n,j} = -E_n^0 - \Delta E_{n,j},$$

где

$$E_n^0 = \frac{1}{2n^2}$$

(выше мы пользуемся атомными единицами, для перехода к обычным единицам приведенное выражение следует умножить на $me^4/\hbar^2 = 27,2$ эВ) — это нерелятивистская бальмеровская энергия связи, а

$$\Delta E_{n,j} = \frac{\alpha^2}{2n^4} \left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right)$$

— релятивистская поправка к ней. Энергии первых трех уровней и релятивистские поправки к ним указаны в приводимой ниже таблице.

n	E_n^0	$(2/\alpha^2) \Delta E_{n,j}$ для			$10^4 \times \Delta E_{n,j}$ для		
		$l=1/2$	$l=3/2$	$l=5/2$	$l=1/2$	$l=3/2$	$l=5/2$
1	$1/2$	$1/4$	—	—	6,68	—	—
2	$1/8$	$5/64$	$1/64$	—	2,08	0,42	—
3	$1/18$	$1/36$	$1/108$	$1/324$	0,74	0,25	0,08

Приведенные данные показывают, что чем ниже уровень, тем сильнее он расщепляется. Именно по этой причине красная линия $H\alpha$ (переход $n=3 \rightarrow n=2$) при грубом разрешении представляется дублетом, компоненты которого расположены на расстоянии

$$(2,08 - 0,42) \times 10^{-6} \times 27,2 \text{ эВ},$$

или $0,365 \text{ см}^{-1}$.

Задача 204. Проблема Кеплера. Радиальные функции при положительных энергиях

Электрон, помещенный в кулоновское поле, обладает положительной энергией, так что $E - mc^2 > 0$. Найти радиальные волновые функции и выяснить их асимптотическое поведение.

Решение. Так как в рассматриваемом случае $mc^2 - E < 0$, то соотношения (202.3) удобно заменить теперь соотношениями

$$\eta k = \frac{E - mc^2}{\hbar c}, \quad \frac{k}{\eta} = \frac{E + mc^2}{\hbar c}, \quad (204.1a)$$

в которых величина k имеет смысл волнового числа на бесконечности. Этим соотношениям можно придать иную форму:

$$\eta = \sqrt{\frac{E - mc^2}{E + mc^2}}, \quad (204.1b)$$

$$k = \frac{\sqrt{(E - mc^2)(E + mc^2)}}{\hbar c}.$$

Наша задача сводится к решению системы дифференциальных уравнений

$$g' + \frac{j + 3/2}{r} g + i \left(-\eta k - \frac{\beta}{r} \right) f = 0, \quad (204.2)$$

$$f' - \frac{j - 1/2}{r} f - i \left(\frac{k}{\eta} + \frac{\beta}{r} \right) g = 0.$$

По аналогии с задачей 202 будем искать решение в виде

$$g = \frac{1}{2} (w + v) r^{s-1} e^{ikr}, \quad (204.3)$$

$$f = \frac{1}{2\eta} (w - v) r^{s-1} e^{ikr},$$

где

$$s = \sqrt{(j + 1/2)^2 - \beta^2}. \quad (204.4)$$

Вводя обозначения

$$P = \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\eta} - \eta \right), \quad Q = \frac{\beta}{2} \left(\frac{1}{\eta} + \eta \right) \quad (204.5)$$

и новую переменную

$$z = -2ikr, \quad (204.6)$$

после несложных вычислений получаем

$$z \frac{d^2 w}{dz^2} + [(2s + 1) - z] \frac{dw}{dz} - (s - iQ) w = 0 \quad (204.7)$$

и

$$v = -\frac{1}{j + 1/2 + iP} \left[z \frac{dw}{dz} + (s - iQ) w \right]. \quad (204.8)$$

Произвольно нормированное решение дифференциального уравнения (204.7), регулярное в начале координат, записывается в виде

$$w = C {}_1F_1(s - iQ, 2s + 1; z). \quad (204.9)$$

Пользуясь далее общей формулой

$$\left(z \frac{d}{dz} + a\right) {}_1F_1(a, c; z) = a {}_1F_1(a+1, c; z),$$

с помощью (204.8) получаем

$$v = -C \frac{s-iQ}{j+1/2+iP} {}_1F_1(1+s-iQ, 2s+1; z). \quad (204.10)$$

Так как величина r действительная и положительная, то, согласно соотношению (204.6), переменная z является чисто мнимой и $\arg z = 3\pi/2$, поэтому мы можем сразу воспользоваться асимптотической формулой

$${}_1F_1(a, c; z) \rightarrow e^{-i\pi a} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} z^{-a} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-c}. \quad (204.11)$$

Таким образом, имеем

$$w \rightarrow \frac{C\Gamma(2s+1)e^{-\frac{\pi Q}{2}}}{(2kr)^s} \left\{ \frac{e^{-\frac{i\pi s}{2} + iQ \ln 2kr}}{\Gamma(1+s+iQ)} + \frac{ie^{-\frac{i\pi s}{2} - iQ \ln 2kr}}{\Gamma(s-iQ)} \cdot \frac{e^{-2ikr}}{2kr} \right\}$$

и

$$v \rightarrow -\frac{C\Gamma(2s+1)e^{-\frac{\pi Q}{2}}}{(2kr)^s} \cdot \frac{s-iQ}{j+1/2+iP} \times \\ \times \left\{ \frac{e^{-\frac{i\pi s}{2} + iQ \ln 2kr}}{i\Gamma(s+iQ)} \cdot \frac{1}{2kr} + \frac{e^{\frac{i\pi s}{2} - iQ \ln 2kr}}{\Gamma(1+s-iQ)} e^{-2ikr} \right\}.$$

Второй член в фигурных скобках в выражении для функции w и первый член в фигурных скобках в выражении для функции v в kr раз меньше других членов, фигурирующих в этих выражениях, поэтому их можно отбросить. В результате с учетом соотношений (204.3) получаем

$$\begin{aligned} rg &\rightarrow C_1 e^{i(kr+Q \ln 2kr)} + C_2 e^{-i(kr+Q \ln 2kr)}, \\ \eta rf &\rightarrow C_1 e^{i(kr+Q \ln 2kr)} - C_2 e^{-i(kr+Q \ln 2kr)}, \end{aligned} \quad (204.12)$$

где постоянные комплексные амплитуды определяются выражениями

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{C\Gamma(2s+1)e^{-\frac{\pi Q}{2}}}{2(2k)^s} \cdot \frac{e^{-\frac{i\pi s}{2}}}{\Gamma(1+s+iQ)}, \\ C_2 &= -\frac{C\Gamma(2s+1)e^{-\frac{\pi Q}{2}}}{2(2k)^s} \cdot \frac{s-iQ}{j+1/2+iP} \cdot \frac{e^{\frac{i\pi s}{2}}}{\Gamma(1+s-iQ)}. \end{aligned} \quad (204.13)$$

Разумеется, постоянные C_1 и C_2 могут отличаться лишь фазовым множителем, так как сходящаяся и расходящаяся парциальные

волны должны иметь одинаковые амплитуды. Действительно, нетрудно показать, что

$$\frac{s-iQ}{j+1/2+iP} = e^{2i\delta} \quad \text{и} \quad \frac{\Gamma(1+s+iQ)}{\Gamma(1+s-iQ)} = e^{2i\zeta}, \quad (204.14)$$

а, следовательно, оба множителя, которыми отличаются друг от друга постоянные C_1 и C_2 , на самом деле являются фазовыми множителями. Для второго из них это очевидно. Что же касается первого множителя, то мы имеем

$$\left| \frac{s-iQ}{j+1/2+iP} \right|^2 = \frac{s^2+Q^2}{(j+1/2)^2+P^2} = 1,$$

поскольку

$$Q^2 - P^2 = \beta^2 \quad \text{и} \quad s^2 = (j+1/2)^2 - \beta^2.$$

Таким образом, окончательно получаем

$$g = |C_1| e^{i\delta} 2i \frac{\sin \xi}{r}, \quad f = |C_1| e^{i\delta} 2 \frac{\cos \xi}{\eta r}, \quad (204.15)$$

где

$$\xi = kr + Q \ln 2kr - \frac{\pi s}{2} - \zeta - \delta. \quad (204.16)$$

Замечание. Этот результат можно сравнить с результатом нерелятивистской теории, рассмотрев предельный случай $\eta \ll 1$. В этом случае $f \gg g$ и

$$f \sim \frac{1}{r} \sin \left(kr + Q \ln 2kr - \frac{\pi}{2} (s+1) - \zeta - \delta \right). \quad (204.17)$$

Фигурирующую здесь величину Q с помощью соотношений (204.5) и (204.16) можно выразить через энергию E , а затем через скорость электрона v на бесконечности. С учетом известной формулы

$$E = mc^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-1/2}$$

получаем

$$Q = \frac{Ze^2}{\hbar v},$$

и, следовательно, величина Q совпадает с параметром κ , введенным в задаче 110. На основании соотношения (204.16), кроме того, заключаем, что величина $\hbar k$ есть импульс электрона на бесконечности. Таким образом, два первых члена в аргументе синуса в формуле (204.17) полностью согласуются с полученным в нерелятивистской теории выражением. В том же приближении постоянный сдвиг фазы вычисляется с помощью соотношений

$$s \rightarrow j+1/2 = l+1 \quad \text{и} \quad P \rightarrow Q = \kappa.$$

Мы имеем

$$\begin{aligned} \frac{\pi}{2} (s+1) + \zeta + \delta &\rightarrow \frac{\pi}{2} (l+2) + \arg \Gamma(l+2+i\kappa) - \arg(l+1+i\kappa) = \\ &= \pi + \frac{\pi}{2} l + \arg \Gamma(l+1+i\kappa). \end{aligned}$$

Если учесть теперь, что знак волновой функции не играет никакой роли и что, следовательно, можно отбросить постоянный сдвиг фазы, равный π , то интересующее нас асимптотическое выражение окончательно запишется в виде

$$f \sim \frac{1}{r} \sin \left\{ kr + \kappa \ln 2kr - \frac{\pi l}{2} - \arg \Gamma(l + 1 + i\kappa) \right\}.$$

Полученный результат полностью согласуется с результатом задачи 111, если принять во внимание, что здесь мы имели дело с кулоновским притяжением.

Задача 205. Разложение дираковской плоской волны по состояниям с определенным моментом

Полученные в задаче 201 общие собственные спиноры операторов J^2 и J_z использовать для разложения плоской дираковской волны

$$\psi = C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \eta \\ 0 \end{pmatrix} e^{ikz} = C \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \eta \\ 0 \end{pmatrix} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l Y_{l,0}, \quad (205.1)$$

которая обладает положительной спиральностью ($h = +1$) и распространяется в направлении оси z .

Решение. Прежде всего решим системы уравнений (201.9а) и (201.9б) в случае свободного движения. Согласно задаче 190, где рассматривались плоские волны, параметр η связан с энергией и импульсом соотношениями

$$\frac{E - mc^2}{\hbar c} = k\eta, \quad \frac{E + mc^2}{\hbar c} = \frac{k}{\eta}. \quad (205.2)$$

С учетом этих соотношений система дифференциальных уравнений (201.9а) записывается в виде

$$g' + \frac{l+3/2}{r} g - ik\eta f = 0, \quad (205.3a)$$

$$f' - \frac{l-1/2}{r} f - i \frac{k}{\eta} g = 0. \quad (205.3б)$$

Из уравнения (205.3б) получаем соотношение

$$i \frac{k}{\eta} g = f' - \frac{l-1/2}{r} f, \quad (205.4)$$

дифференцируя которое, находим

$$i \frac{k}{\eta} g' = f'' - \frac{l-1/2}{r} f' + \frac{l-1/2}{r^2} f.$$

Подставляя последнее выражение в (205.3а), получаем для определения функции f обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка

$$f'' + \frac{2}{r} f' + \left[k^2 - \frac{(j-1/2)(j+1/2)}{r^2} \right] f = 0. \quad (205.5)$$

Регулярное в нуле решение этого уравнения (нормировка произвольная) имеет вид

$$f = \frac{1}{kr} j_{j-1/2}(kr). \quad (205.6)$$

Подставляя теперь выражение (205.6) в соотношение (205.4), находим

$$i \frac{k}{\eta} g = \frac{1}{kr} \left(j'_{j-1/2} - \frac{j+1/2}{kr} j_{j-1/2} \right),$$

причем штрих означает дифференцирование по переменной kr . С помощью известной формулы

$$j'_l(z) - \frac{l+1}{z} j_l(z) = -j_{l+1}(z)$$

окончательно получаем

$$g = \frac{i\eta}{kr} j_{j+1/2}(kr). \quad (205.7)$$

Таким образом, нормировка функции g фиксирована относительно нормировки функции f . Если квантовое число j задано и $m_j = +1/2$, то формулы (205.6) и (205.7) позволяют записать 4-спинор (201.4а) в явном виде:

$$\Psi_j^1 = \frac{1}{kr} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+1/2}{2j}} j_{j-1/2}(kr) Y_{j-1/2, 0} \\ -\sqrt{\frac{j-1/2}{2j}} j_{j-1/2}(kr) Y_{j-1/2, 1} \\ i\eta \sqrt{\frac{j+1/2}{2(j+1)}} j_{j+1/2}(kr) Y_{j+1/2, 0} \\ i\eta \sqrt{\frac{j+3/2}{2(j+1)}} j_{j+1/2}(kr) Y_{j+1/2, 1} \end{pmatrix}. \quad (205.8)$$

Рассмотренные в задаче 201 решения второго типа находятся из уравнений (205.3а) и (205.3б), если в них произвести замену $\eta \rightleftharpoons 1/\eta$. При этом функция f по-прежнему будет определяться выражением (205.6). Что же касается функции g , то выражение для нее получается из (205.7), если там множитель η перевести из числителя в знаменатель. С учетом этих замечаний 4-спинор

(201.46) запишется теперь в виде

$$\psi_j^{11} = \frac{1}{kr} \begin{pmatrix} \frac{i}{\eta} \sqrt{\frac{j+1/2}{2(j+1)}} j_{j+1/2}(kr) Y_{j+1/2, 0} \\ \frac{i}{\eta} \sqrt{\frac{j+3/2}{2(j+1)}} j_{j+1/2}(kr) Y_{j+1/2, 1} \\ \sqrt{\frac{j+1/2}{2j}} j_{j-1/2}(kr) Y_{j-1/2, 0} \\ - \sqrt{\frac{j-1/2}{2j}} j_{j-1/2}(kr) Y_{j-1/2, 1} \end{pmatrix}. \quad (205.9)$$

Из полученных выше 4-спиноров можно построить волновую функцию, подобную функции (205.1), если положить

$$\psi = \sum_j (A_j \psi_j^I + B_j \psi_j^{II}). \quad (205.10)$$

В этом разложении мы можем, разумеется, распорядиться немым индексом j по своему усмотрению. Для дальнейшего удобно ввести орбитальное квантовое число l и во всех суммах, содержащих функции

$$j_{j-1/2}(kr) Y_{j-1/2, m}$$

($m=0$ или 1), положить $j=l+1/2$. В суммах же, содержащих функции

$$j_{j+1/2}(kr) Y_{j+1/2, m},$$

положить $j=l-1/2$. Учитывая далее соотношения (205.8) и (205.9), находим

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{j_l(kr)}{V^{2l+1} kr} \begin{pmatrix} \left(A_{l+1/2} V^{l+1} + B_{l-1/2} \frac{i}{\eta} V^l \right) Y_{l, 0} \\ \left(-A_{l+1/2} V^l + B_{l-1/2} \frac{i}{\eta} V^{l+1} \right) Y_{l, 1} \\ (i\eta A_{l-1/2} V^l + B_{l+1/2} V^{l+1}) Y_{l, 0} \\ (i\eta A_{l-1/2} V^{l+1} - B_{l+1/2} V^l) Y_{l, 1} \end{pmatrix}. \quad (205.11)$$

Нетрудно проверить, что сумма (205.11) сводится к выражению (205.1), если

$$\begin{aligned} A_{l+1/2} &= \sqrt{4\pi} C i^l \sqrt{l+1}, \\ B_{l+1/2} &= \eta \sqrt{4\pi} C i^l \sqrt{l+1}. \end{aligned} \quad (205.12)$$

Задача 206. Рассеяние в поле центральных сил

Частица, описываемая дираковской плоской волной с положительной спиральностью, рассеивается на сферически симметричном потенциале. Получить формулу для асимптотики рассеянной волны, считая, что фазы рассеяния можно взять из решений радиальных волновых уравнений.

Решение. Как было показано в задаче 201, имеется два типа радиальных уравнений.

Тип I

$$\begin{aligned} g'_j + \frac{l+3/2}{r} g_j - ik\eta f_j + iU(r) f_j &= 0, \\ f'_j - \frac{l-1/2}{r} f_j - i \frac{k}{\eta} g_j + iU(r) g_j &= 0, \end{aligned} \quad (206.1a)$$

где

$$U(r) = \frac{V(r)}{\hbar c}.$$

Легко видеть, что для потенциалов $U(r)$, убывающих быстрее $1/r$, решения этой системы уравнений асимптотически ведут себя в соответствии с формулами

$$g_j(r) \rightarrow \frac{i\eta}{r} \sin \sigma_j, \quad f_j(r) \rightarrow \frac{1}{r} \cos \sigma_j \quad (206.2a)$$

и

$$\sigma_j = kr - \left(j + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{2} + \alpha_j. \quad (206.3a)$$

Относительный сдвиг фаз функций g_j и f_j равен $\pi/2$, а их амплитуды при данной произвольной нормировке связаны между собой таким образом, что в нерелятивистском пределе, когда $\eta \rightarrow 0$, функции f_j и g_j становятся радиальными частями соответственно большой и малой компонент волнового спинора. Если функция f_j выбрана действительной, то функция g_j будет чисто мнимой. Фазы рассеяния α_j определяются путем интегрирования системы уравнений (206.1a) при граничных условиях $g_j(0) = 0$ и $f_j(0) = 0$. В нерелятивистском пределе $j = l + 1/2$, поэтому для больших расстояний r можно написать

$$f_j(r) \rightarrow \frac{1}{r} \sin \left(kr - l \frac{\pi}{2} + \alpha_{l+1/2} \right), \quad g_j(r) \rightarrow 0.$$

Тип II

$$\begin{aligned} g'_j + \frac{l+3/2}{r} g_j - i \frac{k}{\eta} f_j + iU(r) f_j &= 0, \\ f'_j - \frac{l-1/2}{r} f_j - ik\eta g_j + iU(r) g_j &= 0. \end{aligned} \quad (206.1b)$$

Асимптотическое поведение решений этой системы определяется формулами

$$g_j \rightarrow \frac{i}{\eta r} \sin \tau_j, \quad f_j \rightarrow \frac{1}{r} \cos \tau_j \quad (206.26)$$

и

$$\tau_j = kr - \left(j + \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{2} + \beta_j, \quad (206.36)$$

где фаза рассеяния β_j , вообще говоря, отличается от фазы рассеяния α_j . Так как система уравнений (206.16) получается из системы уравнений (206.1а) путем замены параметра η параметром $1/\eta$, то в нерелятивистском пределе функция g_j становится радиальной частью большой компоненты волнового спинора, а функция f_j — радиальной частью его малой компоненты. Таким образом, в нерелятивистском пределе имеем $j = l - 1/2$ и, следовательно,

$$g_j(r) \rightarrow \frac{1}{r} \sin \left(kr - l \frac{\pi}{2} + \beta_{l-1/2} \right), \\ f_j(r) \rightarrow 0.$$

Как мы видели в задаче 201, при каждом значении квантового числа j имеется два волновых спинора Ψ_j^I и Ψ_j^{II} , описывающих состояния, в которых проекция полного момента на ось z достоверно равна $1/2$ (в единицах \hbar). Их асимптотика имеет вид

$$\Psi_j^I \rightarrow \frac{1}{kr} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{j+1/2}{2j}} \cos \sigma_j Y_{j-1/2, 0} \\ -\sqrt{\frac{j-1/2}{2j}} \cos \sigma_j Y_{j-1/2, 1} \\ i\eta \sqrt{\frac{j+1/2}{2(j+1)}} \sin \sigma_j Y_{j+1/2, 0} \\ i\eta \sqrt{\frac{j+3/2}{2(j+1)}} \sin \sigma_j Y_{j+1/2, 1} \end{pmatrix}, \quad (206.4)$$

$$\Psi_j^{II} \rightarrow \frac{1}{kr} \begin{pmatrix} \frac{i}{\eta} \sqrt{\frac{j+1/2}{2(j+1)}} \sin \tau_j Y_{j+1/2, 0} \\ \frac{i}{\eta} \sqrt{\frac{j+3/2}{2(j+1)}} \sin \tau_j Y_{j+1/2, 1} \\ \sqrt{\frac{j+1/2}{2j}} \cos \tau_j Y_{j-1/2, 0} \\ -\sqrt{\frac{j-1/2}{2j}} \cos \tau_j Y_{j-1/2, 1} \end{pmatrix}.$$

Общее решение всегда можно записать в форме суперпозиции рассмотренных выше частных решений:

$$\psi = \sum_j (A_j \psi_j^I + B_j \psi_j^{II}). \quad (206.5)$$

Здесь индекс суммирования j можно заменить на $l \pm 1/2$ таким образом, чтобы во всех суммах фигурировали лишь сферические гармоники l -го порядка. В результате асимптотику выражения (206.5) можно записать в виде

$$\psi \rightarrow \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \times \left[\begin{array}{l} \left[\sqrt{l+1} A_{l+1/2} \cos \sigma_{l+1/2} + \frac{i}{\eta} \sqrt{l} B_{l-1/2} \sin \tau_{l-1/2} \right] Y_{l,0} \\ \left[-\sqrt{l} A_{l+1/2} \cos \sigma_{l+1/2} + \frac{i}{\eta} \sqrt{l+1} B_{l-1/2} \sin \tau_{l-1/2} \right] Y_{l,1} \\ \left[i\eta \sqrt{l} A_{l-1/2} \sin \sigma_{l-1/2} + \sqrt{l+1} B_{l+1/2} \cos \tau_{l+1/2} \right] Y_{l,0} \\ \left[i\eta \sqrt{l+1} A_{l-1/2} \sin \sigma_{l-1/2} - \sqrt{l} B_{l+1/2} \cos \tau_{l+1/2} \right] Y_{l,1} \end{array} \right]. \quad (206.6)$$

По своей структуре последнее выражение очень напоминает плоскую волну (205.11), в которую оно переходит, если $\alpha_j = 0$ и $\beta_j = 0$ для всех значений j . В этой связи плоскую волну целесообразно записать в виде

$$\psi^0 = \sum_j (A_j^0 \psi_j^{0I} + B_j^0 \psi_j^{0II}), \quad (206.7)$$

где

$$\begin{aligned} A_{l+1/2}^0 &= \sqrt{4\pi} C i^l \sqrt{l+1}, \\ B_{l+1/2}^0 &= \eta A_{l+1/2}^0, \\ \sigma_{l-1/2}^0 &= \tau_{l-1/2}^0 = kr - l \frac{\pi}{2}. \end{aligned} \quad (206.8)$$

Как известно, граничное условие для задач рассеяния состоит в том, что при $r \rightarrow \infty$ разность

$$\psi_s = \psi - \psi^0 \quad (206.9)$$

содержит лишь расходящиеся сферические волны и не содержит пропорциональные e^{-ikr}/kr сходящиеся сферические волны. Только в этом случае функцию ψ_s можно отождествить с рассеянной волной. С учетом формулы (206.6) указанное граничное условие приводит к следующим четырем уравнениям для определения

коэффициентов:

$$\begin{aligned}
 & \sqrt{l+1} A_{l+1/2} e^{i\left(\frac{\pi}{2}-\alpha_{l+1/2}\right)} + \frac{1}{\eta} \sqrt{l} B_{l-1/2} e^{-i\beta_{l-1/2}} = \\
 & = \sqrt{l+1} A_{l+1/2}^0 e^{i\frac{\pi}{2}} + \frac{1}{\eta} \sqrt{l} B_{l-1/2}^0, \\
 & -\sqrt{l} A_{l+1/2} e^{i\left(\frac{\pi}{2}-\alpha_{l+1/2}\right)} + \frac{1}{\eta} \sqrt{l+1} B_{l-1/2} e^{-i\beta_{l-1/2}} = \\
 & = -\sqrt{l} A_{l+1/2}^0 e^{i\frac{\pi}{2}} + \frac{1}{\eta} \sqrt{l+1} B_{l-1/2}^0, \quad (206.10) \\
 & -\eta \sqrt{l} A_{l-1/2} e^{-i\alpha_{l-1/2}} + \sqrt{l+1} B_{l+1/2} e^{i\left(\frac{\pi}{2}-\beta_{l+1/2}\right)} = \\
 & = -\eta \sqrt{l} A_{l-1/2}^0 + \sqrt{l+1} B_{l+1/2}^0 e^{i\frac{\pi}{2}}, \\
 & -\eta \sqrt{l+1} A_{l-1/2} e^{-i\alpha_{l-1/2}} - \sqrt{l} B_{l+1/2} e^{i\left(\frac{\pi}{2}-\beta_{l+1/2}\right)} = \\
 & = -\eta \sqrt{l+1} A_{l-1/2}^0 - \sqrt{l} B_{l+1/2}^0 e^{i\frac{\pi}{2}}.
 \end{aligned}$$

Эти уравнения удовлетворяются в том и только в том случае, если

$$A_j = A_j^0 e^{i\alpha_j}, \quad B_j = B_j^0 e^{i\beta_j}. \quad (206.11)$$

С помощью последних соотношений нетрудно показать, что асимптотическое поведение рассеянной волны описывается формулой

$$\begin{aligned}
 \psi_s \rightarrow & \sqrt{4\pi} C \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \times \\
 & \times \begin{pmatrix} [(l+1)(e^{2i\alpha_{l+1/2}}-1) + l(e^{2i\beta_{l-1/2}}-1)] Y_{l,0} \\ \sqrt{l(l+1)}(e^{2i\beta_{l-1/2}}-e^{2i\alpha_{l+1/2}}) Y_{l,1} \\ \eta[l(e^{2i\alpha_{l-1/2}}-1) + (l+1)(e^{2i\beta_{l+1/2}}-1)] Y_{l,0} \\ \eta\sqrt{l(l+1)}(e^{2i\alpha_{l-1/2}}-e^{2i\beta_{l+1/2}}) Y_{l,1} \end{pmatrix}. \quad (206.12)
 \end{aligned}$$

Задача 207. Гладкая потенциальная ступенька

На потенциальную ступеньку, описываемую формулой

$$V(z) = \frac{1}{2} V_0 \left(1 + \operatorname{th} \frac{z}{l}\right), \quad (207.1)$$

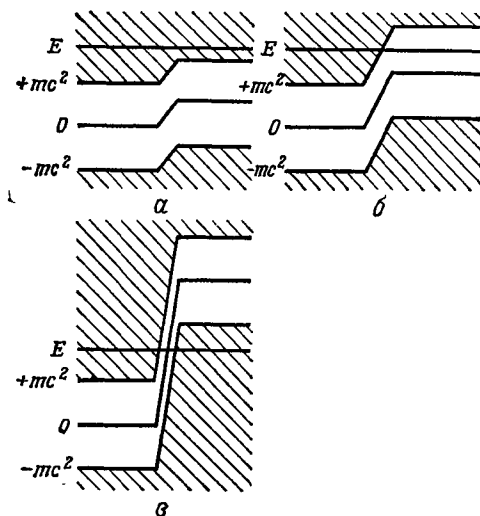
со стороны отрицательных z падает плоская дираковская волна

с положительной спиральностью ($h = +1$). Определить коэффициент прохождения для различных высот потенциальной ступеньки:

$$\begin{aligned} \text{случай а: } & V_0 < E - mc^2, \\ \text{случай б: } & E - mc^2 < V_0 < E + mc^2, \\ \text{случай в: } & E + mc^2 < V_0. \end{aligned} \quad (207.2)$$

Характерные особенности указанных случаев проиллюстрированы на фиг. 72.

Решение. Потенциал, описываемый формулой (207.1), изменяется от значения $V=0$ при $z=-\infty$ до значения $V=+V_0$ при $z=+\infty$. Указанное изменение значений потенциала фактически происходит вблизи точки $z=0$ в пределах слоя толщиной l . Рассматриваемый потенциал представляет частный случай потен-



Фиг. 72. Потенциальные ступеньки различной высоты. Области допустимых значений энергии частицы заштрихованы.

циала задачи 197. Для положительной спиральности ($h = +1$) компоненты волновой функции u_3 и u_4 обращаются в нуль и дело сводится к решению системы двух дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} -i \frac{du_3}{dz} + (\kappa + Q) u_1 &= 0, \\ i \frac{du_1}{dz} + (\kappa - Q) u_3 &= 0, \end{aligned} \quad (207.3)$$

где

$$Q = \frac{V(z) - E}{\hbar c}, \quad \kappa = \frac{mc^2}{\hbar c}. \quad (207.4)$$

Вместо компонент u_1 и u_3 введем их симметричную и антисимметричную комбинации:

$$\varphi_s = u_1 + u_3, \quad \varphi_a = u_1 - u_3. \quad (207.5)$$

Для функций φ_s и φ_a вместо (207.3) получается более простая система уравнений вида

$$-\kappa\varphi_s = i\varphi'_a + Q\varphi_a, \quad \kappa\varphi_a = i\varphi'_s - Q\varphi_s, \quad (207.6)$$

из которой нетрудно исключить одну из них, например φ_a . Имеем

$$\varphi''_s + (Q^2 - \kappa^2 + iQ')\varphi_s = 0. \quad (207.7)$$

Решив это уравнение при соответствующих граничных условиях, мы затем с помощью второго уравнения (207.6) найдем функцию φ_a .

Если вместо z перейти к новой независимой переменной

$$x = (1 + e^{2z/l})^{-1}, \quad (207.8)$$

то коэффициенты дифференциального уравнения (207.7) станут рациональными функциями x . Учитывая соотношения

$$\frac{du}{dz} = -\frac{2}{l}x(1-x)\frac{du}{dx}, \quad V(z) = V_0(1-x) \quad (207.9)$$

и вводя безразмерные параметры

$$\varepsilon = \frac{El}{2\hbar c}, \quad \varepsilon_0 = \frac{Imc^2}{2\hbar c}, \quad v_0 = \frac{lV_0}{2\hbar c} \quad (207.10)$$

(величина $2\hbar c/l$ играет у нас роль единицы энергии), можно придать уравнению (207.7) следующую форму:

$$x(1-x)\frac{d}{dx}\left[x(1-x)\frac{d\varphi_s}{dx}\right] + \{[v_0(1-x) - \varepsilon]^2 - \varepsilon_0^2 + iv_0x(1-x)\}\varphi_s = 0. \quad (207.11)$$

Последнее уравнение после очевидной замены

$$\varphi_s = x^\nu(1-x)^\mu f(x), \quad (207.12)$$

где

$$\nu^2 = \varepsilon_0^2 - (\varepsilon - v_0)^2, \quad \mu^2 = \varepsilon_0^2 - \varepsilon^2, \quad (207.13)$$

сводится к уравнению для гипергеометрической функции

$$x(1-x)f'' + [(2\nu+1) - (2\nu+2\mu+2)x]f' - (\mu+\nu-iv_0)(\mu+\nu-iv_0+1)f = 0. \quad (207.14)$$

В дальнейшем нам понадобится, как мы сейчас убедимся, только решение, регулярное в точке $x=0$. Такое решение имеет вид

$$f(x) = {}_2F_1(\mu + \nu - i\nu_0, \mu + \nu + i\nu_0 + 1, 2\nu + 1; x). \quad (207.15)$$

Рассмотрим *граничные условия*. Согласно соотношению (207.8), имеем

$$x=1 \quad \text{при } z=-\infty \quad \text{и} \quad x=0 \quad \text{при } z=+\infty.$$

Далее, согласно равенствам (207.10) и (207.13),

$$\mu = -i \frac{l}{2} k, \quad k^2 = \frac{E^2 - (mc^2)^2}{(\hbar c)^2} = \left(\frac{p}{\hbar}\right)^2, \quad (207.16)$$

поэтому величина μ всегда является чисто мнимым параметром, пропорциональным импульсу падающей частицы $p = \hbar k$. В окрестности точки $x=1$ гипергеометрическую функцию (207.15) можно преобразовать с помощью формулы

$${}_2F_1(a, b, c; x) = \frac{\Gamma(c) \Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a) \Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b, a+b-c+1; 1-x) + \\ + (1-x)^{c-a-b} \frac{\Gamma(c) \Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a) \Gamma(b)} {}_2F_1(c-a, c-b, c-a-b+1; 1-x).$$

Таким образом, из (207.8) и (207.15) при $x \approx 1$ ($z \rightarrow -\infty$) имеем

$$\varphi_s \rightarrow (1-x)^\mu \left\{ \frac{\Gamma(2\nu+1) \Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\nu-\mu+i\nu_0+1) \Gamma(\nu-\mu-i\nu_0)} + \right. \\ \left. + (1-x)^{-2\mu} \frac{\Gamma(2\nu+1) \Gamma(2\mu)}{\Gamma(\nu+\mu-i\nu_0) \Gamma(\nu+\mu+i\nu_0+1)} \right\}.$$

Учитывая далее, что

$$1-x = \frac{e^{2z/l}}{1+e^{2z/l}} \rightarrow e^{2z/l},$$

получаем

$$\varphi_s \rightarrow A e^{ikz} + B e^{-ikz}, \quad (207.17)$$

где

$$A = \frac{\Gamma(2\nu+1) \Gamma(2\mu)}{\Gamma(\nu+\mu-i\nu_0) \Gamma(\nu+\mu+i\nu_0+1)} \quad (207.18a)$$

и

$$B = \frac{\Gamma(2\nu+1) \Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\nu-\mu-i\nu_0) \Gamma(\nu-\mu+i\nu_0+1)}. \quad (207.18b)$$

Выражение для амплитуды A отличается от выражения для амплитуды B лишь знаком перед величиной μ . Как можно было ожидать исходя из физических соображений, функция φ_s при больших отрицательных значениях z представляет собой суперпозицию падающей волны с амплитудой A и отраженной волны

с амплитудой B . Таким образом, частное решение (207.15) удовлетворяет граничным условиям при больших отрицательных значениях z . Функция φ_a также состоит из суперпозиции двух типов волн. В этом можно убедиться, подставляя асимптотическое решение (207.17) в уравнение (207.6). Указанная подстановка дает

$$\varphi_a \rightarrow A \left(\frac{E}{mc^2} - \frac{k}{\kappa} \right) e^{ikz} + B \left(\frac{E}{mc^2} + \frac{k}{\kappa} \right) e^{-ikz}. \quad (207.19)$$

Плотность электрического тока [см. задачу 198, соотношение (198.13)], если отбросить интерференционные члены, состоит из двух частей. Действительно,

$$j_z = ec (u_1^* u_3 + u_3^* u_1) = \frac{1}{2} ec (|\varphi_s|^2 - |\varphi_a|^2) \quad (207.20)$$

и, следовательно,

$$j_z = j_{\text{пад}} - j_{\text{отр}}, \quad (207.21)$$

где плотности тока падающих и отраженных частиц соответственно равны

$$j_{\text{пад}} = \frac{1}{2} ec |A|^2 \left[1 - \left(\frac{E}{mc^2} - \frac{k}{\kappa} \right)^2 \right] = ec |A|^2 \frac{cp(E - cp)}{(mc^2)^2} \quad (207.22)$$

и

$$j_{\text{отр}} = \frac{1}{2} ec |B|^2 \left[1 - \left(\frac{E}{mc^2} + \frac{k}{\kappa} \right)^2 \right] = ec |B|^2 \frac{cp(E + cp)}{(mc^2)^2}, \quad (207.23)$$

а энергия и импульс частицы связаны соотношением

$$E = \sqrt{(cp)^2 + (mc^2)^2}.$$

Перейдем теперь к обсуждению поведения волновой функции в правой части потенциальной ступеньки, т. е. вблизи точки $x = 0$, или, другими словами, при $z \rightarrow +\infty$. Из формул (207.12) и (207.15) непосредственно следует

$$\varphi_s \rightarrow x^\nu = e^{-\frac{2}{l} \nu z}, \quad (207.24)$$

где, согласно соотношениям (207.10) и (207.13),

$$\nu = -i \frac{l}{2} k', \quad k'^2 = \frac{(E - V_0)^2 - (mc^2)^2}{(\hbar c)^2}. \quad (207.25)$$

Теперь мы должны по отдельности разобрать три случая, указанные в условии задачи. Если $E - V_0 > mc^2$ или $V_0 - E > mc^2$ (случай *a* и *в*), то величина k'^2 положительная ($k'^2 > 0$) и, следовательно, величина k' действительная. Если же $|E - V_0| < mc^2$ (случай *б*), то величина k' чисто мнимая, а величина ν действительная. В этом последнем случае при $\nu > 0$ вид выражения

(207.24) говорит о том, что мы имеем дело с полным отражением падающей волны, так что коэффициент отражения

$$R = \frac{j_{отр}}{j_{пад}} = \left| \frac{B}{A} \right|^2 \frac{E + cp}{E - cp} \quad (207.26)$$

должен равняться единице.

В этом нетрудно убедиться, взяв для амплитуд выражения (207.18а) и (207.18б) и воспользовавшись тождеством

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z).$$

Имеем

$$\frac{B}{A} = \frac{\nu + \mu + i\nu_0}{\nu - \mu + i\nu_0} \cdot \frac{\Gamma(\nu + \mu - i\nu_0)\Gamma(\nu + \mu + i\nu_0)}{\Gamma(\nu - \mu + i\nu_0)\Gamma(\nu - \mu - i\nu_0)} \cdot \frac{\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(2\mu)}. \quad (207.27)$$

Так как величина μ всегда чисто мнимая,

$$\mu = -i\sigma,$$

то третий сомножитель в (207.27) не дает никакого вклада в абсолютную величину отношения $|B/A|$. Если величина ν действительная (случай б), то второй сомножитель также является отношением двух комплексно сопряженных величин и, следовательно, не дает вклада в абсолютную величину рассматриваемого отношения. Таким образом, имеем

$$\left| \frac{B}{A} \right|^2 = \frac{\nu^2 + (\nu_0 - \sigma)^2}{\nu^2 + (\nu_0 + \sigma)^2} = \frac{2\nu_0(\varepsilon - \sigma)}{2\nu_0(\varepsilon + \sigma)} = \frac{E - cp}{E + cp},$$

поэтому из (207.26) действительно следует, что $R = 1$. В случаях а и в (ν — мнимая величина) в области далеко справа существует бегущая волна, поскольку

$$\varphi_s \rightarrow e^{ik'z}$$

и, кроме того, согласно уравнению (207.6),

$$\varphi_a \rightarrow \left(-\frac{k'}{\kappa} + \frac{E - V_0}{mc^2} \right) e^{ik'z} = \frac{E' - cp'}{mc^2} e^{ik'z}.$$

В этих выражениях $p' = \hbar k'$ — импульс прошедших частиц, а $E' = E - V_0$. Плотность электрического тока прошедших частиц в силу соотношения (207.20) имеет вид

$$j_{пр} = \frac{1}{2} ec \left[1 - \left(\frac{E' - cp'}{mc^2} \right)^2 \right] = ec \frac{cp'(E' - cp')}{(mc^2)^2}. \quad (207.28)$$

Отсюда с учетом выражения (207.22) для коэффициента прохождения получаем формулу

$$T = \frac{j_{пр}}{j_{пад}} = \frac{1}{|A|^2} \cdot \frac{cp'(E' - cp')}{cp(E - cp)}. \quad (207.29)$$

Чтобы теперь вычислить величину $|A|^2$, мы, кроме тождества

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z),$$

воспользуемся общей формулой

$$|\Gamma(\pm iy)|^2 = \frac{\pi}{y \operatorname{sh} \pi y}, \quad y — \text{действительное число.}$$

Учитывая, что

$$\mu = -i\sigma, \quad \nu = -i\sigma',$$

с помощью (207.18а) получаем

$$\frac{1}{|A|^2} = \frac{\sigma}{\sigma'} \cdot \frac{\sigma + \sigma' - v_0}{\sigma + \sigma' + v_0} \frac{\operatorname{sh} 2\pi\sigma \operatorname{sh} 2\pi\sigma'}{\operatorname{sh} \pi(\sigma + \sigma' + v_0) \operatorname{sh} \pi(\sigma + \sigma' - v_0)}. \quad (207.30)$$

При подстановке последнего выражения в формулу (207.29) в ней появляется множитель

$$\frac{c\rho'(E' - c\rho')}{c\rho(E - c\rho)} \cdot \frac{\sigma}{\sigma'} \cdot \frac{\sigma + \sigma' - v_0}{\sigma + \sigma' + v_0} = \frac{(E' - c\rho')(c\rho + c\rho' - V_0)}{(E - c\rho)(c\rho + c\rho' + V_0)},$$

который, как легко показать, равен единице. Действительно, заменяя здесь V_0 на $E - E'$ и учитывая, что

$$E'^2 - (c\rho')^2 = E^2 - (c\rho)^2 = (mc^2)^2,$$

получаем

$$\frac{(E' - c\rho')(c\rho + c\rho' - V_0)}{(E - c\rho)(c\rho + c\rho' + V_0)} = \frac{(E' - c\rho')(E' + c\rho') - (E' - c\rho')(E - c\rho)}{(E - c\rho)(E + c\rho) - (E - c\rho)(E' - c\rho')} = 1.$$

Таким образом, выражение для коэффициента прохождения принимает вид

$$T = \frac{\operatorname{sh} 2\pi\sigma \operatorname{sh} 2\pi\sigma'}{\operatorname{sh} \pi(\sigma + \sigma' + v_0) \operatorname{sh} \pi(\sigma + \sigma' - v_0)}. \quad (207.31)$$

В знаменателе этого выражения удобно выделить характеристическую величину v_0 , пропорциональную произведению высоты ступеньки на ее ширину и не зависящую от энергии частицы:

$$T = \frac{\operatorname{sh} 2\pi\sigma \operatorname{sh} 2\pi\sigma'}{\operatorname{sh}^2 \pi(\sigma + \sigma') \operatorname{ch}^2 \pi v_0 - \operatorname{ch}^2 \pi(\sigma + \sigma') \operatorname{sh}^2 \pi v_0}. \quad (207.32)$$

В случае a мы имеем $\sigma + \sigma' - v_0 > 0$ или $V_0 < c(\rho + \rho')$. Этот случай можно назвать нормальным: он имеет место и в нерелятивистской теории. С другой стороны, $\sigma + \sigma' - v_0 < 0$ в случае b и, следовательно, $T < 0$. Волна проникает в область отрицательных энергий (см. фиг. 72), где положительному импульсу сопутствует отрицательный электрический ток. В пределе $\pi v_0 \gg 1$ или

$$V_0 \gg \frac{2\pi\hbar c}{l}$$

выражение (207.32) упрощается и принимает вид

$$T = -4 \operatorname{sh} \frac{\pi l p}{\hbar} \operatorname{sh} \frac{\pi l p'}{\hbar} e^{-\frac{\pi V_0}{\hbar c}}.$$

Отсюда видно, что проникаемость потенциальной ступеньки при переходах от положительных энергий к отрицательным быстро падает по мере роста „эффективного размера“ ступеньки $V_0 l$. Так как $V_0 > mc^2$ в случае v , то экспонента в выражении для коэффициента прохождения T дает вклад, который заведомо меньше

$$e^{-\frac{\pi mc}{\hbar}} = e^{-\pi l/\lambda},$$

где $\lambda = \hbar/mc$ — комптоновская длина волны.

Литература

Klein O., Zs. Phys., 53, 157 (1929).

Sauter F., Zs. Phys., 69, 742; 73, 547 (1931).

(См. также *Зоммерфельд А.*, Строение атома и спектры, т. 2, М., стр. 270—282. — Прим. ред.)

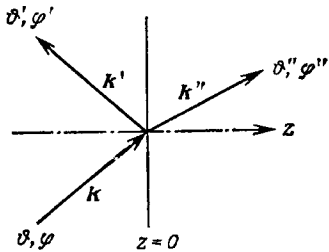
Задача 208. Наклонное падение плоской волны на прямоугольную потенциальную ступеньку

Частица, описываемая дираковской плоской волной с произвольной поляризацией, наклонно падает на потенциальную ступеньку, высота которой меньше кинетической энергии частицы. Получить законы отражения и преломления, а также вычислить поляризацию прошедшей волны.

Решение. Обозначим посредством ψ , ψ' и ψ'' соответственно падающую, отраженную и прошедшую волны. Пусть далее k , k' и k'' — волновые векторы этих волн, направления которых характеризуются соответственно сферическими углами ϑ , φ , ϑ' , φ' и ϑ'' , φ'' . Мы будем считать, что преломляющая плоскость совпадает с плоскостью $z=0$ и что волны ψ и ψ' распространяются в области $z < 0$, а волна ψ'' в области $z > 0$ (см. фиг. 73).

В плоскости $z=0$ для всех значений x и y должно выполняться соотношение

$$\psi + \psi' = \psi'', \quad (208.1)$$



Фиг. 73. Наклонное падение плоской волны на потенциальную ступеньку.

в силу которого все три волновых вектора \mathbf{k} имеют равные проекции на оси x и y :

$$k \sin \vartheta \cos \varphi = k \sin \vartheta' \cos \varphi' = k'' \sin \vartheta'' \cos \varphi'',$$

$$k \sin \vartheta \sin \varphi = k \sin \vartheta' \sin \varphi' = k'' \sin \vartheta'' \sin \varphi''.$$

Мы сможем удовлетворить этим соотношениям, положив

$$\varphi = \varphi' = \varphi'', \quad (208.2)$$

$$\vartheta' = \pi - \vartheta, \quad (208.3)$$

$$k \sin \vartheta = k'' \sin \vartheta''. \quad (208.4)$$

Равенство (208.2) показывает, что все три волновых вектора \mathbf{k} лежат в одной меридиональной плоскости, которую мы можем выбрать в качестве плоскости xz . При таком выборе y -компоненты волновых векторов обращаются в нуль ($\varphi = 0$, $\varphi' = 0$, $\varphi'' = 0$). Равенство (208.3) в этом случае выражает закон отражения, а равенство (208.4) — закон преломления, причем показатель преломления, очевидно, определяется соотношением $n = k''/k$. Оба закона совпадают с соответствующими законами для нерелятивистских шредингеровских волн (см. задачу 45).

Дополнительные эффекты в релятивистской теории связаны с поляризацией волн. Полагая $\varphi = 0$ и $\vartheta' = \pi - \vartheta$, запишем три рассматриваемые волновые функции в стандартном представлении:

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V(1+\eta^2)}} \begin{pmatrix} A \cos \frac{\vartheta}{2} + B \sin \frac{\vartheta}{2} \\ A \sin \frac{\vartheta}{2} - B \cos \frac{\vartheta}{2} \\ \eta \left(A \cos \frac{\vartheta}{2} - B \sin \frac{\vartheta}{2} \right) \\ \eta \left(A \sin \frac{\vartheta}{2} + B \cos \frac{\vartheta}{2} \right) \end{pmatrix}, \\ \psi' &= \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V(1+\eta^2)}} \begin{pmatrix} C \sin \frac{\vartheta}{2} + D \cos \frac{\vartheta}{2} \\ C \cos \frac{\vartheta}{2} - D \sin \frac{\vartheta}{2} \\ \eta \left(C \sin \frac{\vartheta}{2} - D \cos \frac{\vartheta}{2} \right) \\ \eta \left(C \cos \frac{\vartheta}{2} + D \sin \frac{\vartheta}{2} \right) \end{pmatrix}, \\ \psi'' &= \frac{e^{i\mathbf{k}''\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{V(1+\eta'^2)}} \begin{pmatrix} E \cos \frac{\vartheta''}{2} + F \sin \frac{\vartheta''}{2} \\ E \sin \frac{\vartheta''}{2} - F \cos \frac{\vartheta''}{2} \\ \eta'' \left(E \cos \frac{\vartheta''}{2} - F \sin \frac{\vartheta''}{2} \right) \\ \eta'' \left(E \sin \frac{\vartheta''}{2} + F \cos \frac{\vartheta''}{2} \right) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (208.5)$$

Выше первые части спиноров, пропорциональные постоянным A , C и E , характеризуют состояния с положительной спиральностью $+1$, а вторые части, пропорциональные постоянным B , D и F , — состояния с отрицательной спиральностью -1 .

Граничное условие (208.1) применительно к амплитудам дает

$$\begin{aligned} A + pB + pC + D &= r(E + qF), \\ pA - B + C - pD &= r(qE - F), \\ A - pB + pC - D &= r\lambda(E - qF), \\ pA + B + C + pD &= r\lambda(qE + F), \end{aligned} \quad (208.6)$$

где

$$\begin{aligned} p &= \operatorname{tg} \frac{\phi}{2}, & q &= \operatorname{tg} \frac{\phi''}{2}, \\ r &= \sqrt{\frac{1 + \eta^2}{1 + \eta'^2}} \frac{\cos \frac{\phi''}{2}}{\cos \frac{\phi}{2}}, & \lambda &= \frac{\eta''}{\eta}. \end{aligned} \quad (208.7)$$

Комбинируя равенства (208.6), получаем

$$\begin{aligned} A + pC &= \frac{1}{2} r [(1 + \lambda) E + (1 - \lambda) qF], \\ pA + C &= \frac{1}{2} r [(1 + \lambda) qE - (1 - \lambda) F] \end{aligned} \quad (208.8a)$$

и

$$\begin{aligned} B + pD &= \frac{1}{2} r [-(1 - \lambda) qE + (1 + \lambda) F], \\ pB + D &= \frac{1}{2} r [(1 - \lambda) E + (1 + \lambda) qF]. \end{aligned} \quad (208.85)$$

Из первой пары уравнений исключим амплитуду C , а из второй пары — амплитуду D . В результате у нас получатся соотношения, связывающие амплитуды прошедшей волны E и F с амплитудами падающей волны A и B :

$$\begin{aligned} (1 - p^2) A &= \frac{1}{2} r [(1 + \lambda) (1 - pq) E + (1 - \lambda) (p + q) F], \\ (1 - p^2) B &= \frac{1}{2} r [-(1 - \lambda) (p + q) E + (1 + \lambda) (1 - pq) F]. \end{aligned} \quad (208.9)$$

Среднее значение спиральности (или, иначе, продольная поляризация) падающей волны определяется выражением

$$h = \frac{A^2 - B^2}{A^2 + B^2} = \frac{1 - (B/A)^2}{1 + (B/A)^2}. \quad (208.10)$$

Аналогичным выражением определяется и продольная поляризация прошедшей волны:

$$h'' = \frac{E^2 - F^2}{E^2 + F^2} = \frac{1 - (F/E)^2}{1 + (F/E)^2}. \quad (208.11)$$

Из соотношений (208.9) находим

$$\frac{B}{A} = \frac{-(1-\lambda)(p+q) + (1+\lambda)(1-pq)(F/E)}{(1+\lambda)(1-pq) + (1-\lambda)(p+q)(F/E)}. \quad (208.12)$$

Последнее выражение можно значительно упростить, введя параметр u :

$$u = \frac{1-\lambda}{1+\lambda} \frac{p+q}{1-pq} = \frac{\eta - \eta''}{\eta + \eta''} \operatorname{tg} \frac{\Phi + \Phi''}{2}. \quad (208.13)$$

С учетом (208.13) выражение (208.12) принимает вид

$$\frac{B}{A} = \frac{(F/E) - u}{1 + u(F/E)}. \quad (208.14)$$

Если в этой формуле выразить отношения B/A и F/E через поляризации h и h'' , определяемые формулами (208.10) и (208.11), то нетрудно показать, что

$$h'' = \frac{1-u^2}{1+u^2} h - \frac{2u}{1+u^2} \sqrt{1-h^2}. \quad (208.15)$$

Когда падающая волна полностью продольно поляризована ($h = \pm 1$), имеем

$$h'' = \pm \frac{1-u^2}{1+u^2},$$

т. е. потенциальная ступенька частично деполяризует волну; однако эта деполяризация является эффектом второго порядка по параметру u . С другой стороны, в случае продольно неполяризованного пучка ($h = 0$) получаем

$$h'' = -\frac{2u}{1+u^2},$$

так что наличие потенциальной ступеньки приводит по крайней мере к частичной продольной поляризации пучка, причем этот эффект линеен по параметру u . На практике параметр u оказывается сравнительно малой величиной ($u \approx 0,1$), поэтому частичная поляризация первично неполяризованного пучка представляет больший интерес, чем частичная деполяризация пучка с вполне определенной спиральностью. В заключение следует отметить, что параметр u обращается в нуль в случае нормального падения, поэтому рассмотренные эффекты проявляются более отчетливо при скользющем падении первичного пучка.

Задача 209. Отражение от прямоугольной потенциальной ступеньки при наклонном падении

Частица, описываемая плоской волной со смешанной спиральностью, падает наклонно на потенциальную ступеньку. Вычислить коэффициент отражения и доказать, что плотность тока непрерывна на поверхности, где потенциал испытывает скачок.

Решение. Плотность электрического тока

$$j_t = iec\psi^\dagger \gamma_4 \gamma_t \psi = ec\psi^\dagger \alpha_t \psi$$

можно следующим образом выразить через компоненты спинора ψ_μ в стандартном представлении:

$$\begin{aligned} j_x &= ec (\psi_1^* \psi_4 + \psi_2^* \psi_3 + \psi_3^* \psi_2 + \psi_4^* \psi_1), \\ j_y &= eci (-\psi_1^* \psi_4 + \psi_2^* \psi_3 - \psi_3^* \psi_2 + \psi_4^* \psi_1), \\ j_z &= ec (\psi_1^* \psi_3 - \psi_2^* \psi_4 + \psi_3^* \psi_1 - \psi_4^* \psi_2). \end{aligned}$$

В случае плоской волны экспоненциальные множители, входящие в ψ_μ^* и ψ_ν , взаимно сокращаются. Что же касается постоянных спинорных амплитуд (208.5), то при нашем выборе системы координат, благодаря которому $\varphi = 0$, их можно, не нарушая общности, считать действительными. При этом, как и следовало ожидать, $j_y = 0$. Для падающей волны две другие компоненты плотности тока имеют вид

$$\begin{aligned} j_x &= \frac{2ec}{V(1+\eta^2)} \left[\left(A \cos \frac{\vartheta}{2} + B \sin \frac{\vartheta}{2} \right) \eta \left(A \sin \frac{\vartheta}{2} + B \cos \frac{\vartheta}{2} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \left(A \sin \frac{\vartheta}{2} - B \cos \frac{\vartheta}{2} \right) \eta \left(A \cos \frac{\vartheta}{2} - B \sin \frac{\vartheta}{2} \right) \right], \\ j_z &= \frac{2ec}{V(1+\eta^2)} \left[\left(A \cos \frac{\vartheta}{2} + B \sin \frac{\vartheta}{2} \right) \eta \left(A \cos \frac{\vartheta}{2} - B \sin \frac{\vartheta}{2} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \left(A \sin \frac{\vartheta}{2} - B \cos \frac{\vartheta}{2} \right) \eta \left(A \sin \frac{\vartheta}{2} + B \cos \frac{\vartheta}{2} \right) \right]. \end{aligned}$$

Отсюда после очевидных упрощений получаем

$$\begin{aligned} j_x &= \frac{2ec\eta}{V(1+\eta^2)} (A^2 + B^2) \sin \vartheta, \\ j_z &= \frac{2ec\eta}{V(1+\eta^2)} (A^2 + B^2) \cos \vartheta. \end{aligned} \tag{209.1}$$

Аналогичные формулы справедливы для отраженной волны:

$$\begin{aligned} j'_x &= \frac{2ec\eta}{V(1+\eta^2)} (C^2 + D^2) \sin \vartheta, \\ j'_z &= -\frac{2ec\eta}{V(1+\eta^2)} (C^2 + D^2) \cos \vartheta \end{aligned} \tag{209.2}$$

и для прошедшей волны ¹⁾:

$$\begin{aligned} j_x'' &= \frac{2ec\eta''}{V(1+\eta''^2)} (E^2 + F^2) \sin \vartheta'', \\ j_z'' &= \frac{2ec\eta''}{V(1+\eta''^2)} (E^2 + F^2) \cos \vartheta''. \end{aligned} \quad (209.3)$$

Чтобы вычислить эти плотности токов, мы сначала выразим амплитуды C, D, E, F через амплитуды A и B падающей волны, решив для этого систему линейных уравнений (208.6) или эквивалентную ей систему (208.8а), (208.8б). В результате элементарных, но довольно трудоемких вычислений получаем

$$C = \frac{-\alpha A + \beta B}{\Delta}, \quad D = -\frac{\beta A + \alpha B}{\Delta}, \quad (209.4)$$

$$E = \frac{\rho A + \sigma B}{2r\lambda}, \quad F = \frac{-\sigma A + \rho B}{2r\lambda}, \quad (209.5)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha &= 2(\lambda^2 + 1)p(1 + q^2) - 4\lambda q(1 + p^2), \\ \beta &= (\lambda^2 - 1)(1 - p^2)(1 + q^2), \\ \Delta &= (\lambda + 1)^2(1 - pq)^2 + (\lambda - 1)^2(p + q)^2, \\ \rho\Delta &= (\lambda + 1)(\Delta - \alpha p) - (\lambda - 1)\beta = 4\lambda(\lambda + 1)(1 - pq)(1 - p^2), \\ \sigma\Delta &= (\lambda - 1)(p\Delta - \alpha) + (\lambda + 1)\beta p = 4\lambda(\lambda - 1)(p + q)(1 - p^2). \end{aligned} \quad (209.6)$$

Из соотношений (209.4) и (209.5) далее находим

$$\begin{aligned} \Delta^2(C^2 + D^2) &= (\alpha^2 + \beta^2)(A^2 + B^2), \\ 4r^2\lambda^2(E^2 + F^2) &= (\rho^2 + \sigma^2)(A^2 + B^2). \end{aligned} \quad (209.7)$$

Подставляя выражения (209.6) в соотношения (209.7), после простых, но довольно длинных преобразований получаем

$$\Delta(\rho^2 + \sigma^2) = 16\lambda^2(1 - p^2)^2 \quad (209.8)$$

и

$$\Delta^2 - (\alpha^2 + \beta^2) = \Delta 4\lambda(1 - p^2)(1 - q^2). \quad (209.9)$$

Теперь нетрудно выразить плотности токов отраженных и прошедших частиц через плотность тока падающих частиц; например, для z -компонент, перпендикулярных плоскости, на которой

¹⁾ Так как

$$\int e^{i(k-k')r} d^3x = 0,$$

то интерференционные члены, обусловленные наложением отраженной и падающей волн, для нас несущественны и их можно опустить. Эти члены могут представлять интерес при изучении локального поведения плотности тока (см. задачу 23).

потенциал испытывает скачок, имеем

$$j'_z = -\frac{C^2 + D^2}{A^2 + B^2} j_z = -\frac{\alpha^2 + \beta^2}{\Delta^2} j_z \quad (209.10)$$

и

$$j''_z = \frac{\eta''}{1 + \eta''^2} \frac{1 + \eta^2 \cos \vartheta''}{\eta \cos \vartheta} \frac{E^2 + F^2}{A^2 + B^2} j_z = \frac{\eta''}{\eta} \frac{1 + \eta^2}{1 + \eta''^2} \frac{\cos \vartheta''}{\cos \vartheta} \frac{\rho^2 + \sigma^2}{4r^2 \lambda^2} j_z.$$

Пользуясь далее обозначениями (208.7), легко показать, что

$$\frac{\eta''}{\eta} \frac{1 + \eta^2}{1 + \eta''^2} \frac{\cos \vartheta''}{\cos \vartheta} \frac{1}{r^2} = \lambda \frac{1 - q^2}{1 - p^2}$$

и, следовательно,

$$j''_z = \frac{1 - q^2}{1 - p^2} \frac{\rho^2 + \sigma^2}{4\lambda} j_z. \quad (209.11)$$

Комбинируя соотношения (209.10) и (209.11) с соотношениями (209.8) и (209.9), находим

$$\begin{aligned} j'_z &= - \left[1 - \frac{4\lambda (1 - p^2) (1 - q^2)}{\Delta} \right] j_z, \\ j''_z &= \frac{4\lambda (1 - p^2) (1 - q^2)}{\Delta} j_z, \end{aligned} \quad (209.12)$$

где Δ определяется по формуле (209.6). Из последних соотношений сразу же следует уравнение непрерывности

$$j_z + j'_z = j''_z. \quad (209.13)$$

Отсюда же для коэффициента отражения получаем

$$R = 1 - \frac{4\lambda (1 - p^2) (1 - q^2)}{\Delta}. \quad (209.14)$$

В случае нормального падения ($p = 0$, $q = 0$) коэффициент отражения имеет особенно простой вид:

$$R = \frac{(\lambda - 1)^2}{(\lambda + 1)^2}. \quad (209.15)$$

VII. Теория излучения

Задача 210. Квантование шредингеровского волнового поля

Записав подходящим образом энергию, импульс и электрический заряд шредингеровского волнового поля в свободном пространстве, обсудить процедуру квантования этого поля в соответствии со статистикой Бозе и статистикой Ферми.

Решение. Будем рассматривать уравнение Шредингера для свободной частицы в качестве уравнения для классического волнового поля ψ , которое, таким образом, представляет собой скалярную функцию пространственных координат и времени. Если пользоваться обычной нормировкой, то энергия, импульс и электрический заряд этого поля определяются соответственно (см. задачи 3 и 5) следующими интегральными выражениями:

$$W = -\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi^* \nabla^2 \psi d^3x, \quad (210.1)$$

$$P = \frac{\hbar}{i} \int \psi^* \nabla \psi d^3x \quad (210.2)$$

и

$$Q = e \int \psi^* \psi d^3x. \quad (210.3)$$

Здесь m и e следует рассматривать как феноменологические параметры, которые пока еще никак не связаны с физическими массами и зарядами частиц.

Как мы знаем, шредингеровское поле должно удовлетворять двум сопряженным волновым уравнениям

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi, \\ \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*. \end{aligned} \quad (210.4)$$

Частные решения этих уравнений имеют вид плоских волн, которые мы нормируем, вводя куб периодичности произвольного объема \mathcal{V} . Тогда общее решение можно записать следующим образом:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \mathcal{V}^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad (210.5)$$

причем закон дисперсии, согласно (210.4), имеет вид

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (210.6)$$

Если теперь общее решение (210.5) подставить в выражения (210.1)—(210.3) и воспользоваться условием ортонормированности плоских волн,

$$\frac{1}{\mathcal{V}^2} \int_{\mathcal{V}^2} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} d^3x = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'},$$

то нетрудно показать, что

$$W = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{k}} k^2 c_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}}, \quad P = \sum_{\mathbf{k}} \hbar \mathbf{k} c_{\mathbf{k}}^* c_{\mathbf{k}}, \quad Q = e \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}. \quad (210.7)$$

Теперь мы приступаем к квантованию развитой выше классической теории. Волновую функцию ψ заменяем оператором $\hat{\psi}$, действующим на гильбертовы векторы состояний χ в пространстве числа частиц. Такой же смысл имеют теперь и коэффициенты Фурье $c_{\mathbf{k}}$, фигурирующие в разложении (210.5). При этом операторы $c_{\mathbf{k}}$ и эрмитово сопряженные с ними операторы $c_{\mathbf{k}}^\dagger$ необходимо подобрать таким образом, чтобы собственные значения произведения $c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}}$ были целыми числами, а именно:

$$\begin{aligned} N_{\mathbf{k}} &= 0, 1, 2, \dots \text{ в случае статистики Бозе,} \\ N_{\mathbf{k}} &= 0, 1 \quad \text{в случае статистики Ферми.} \end{aligned} \quad (210.8)$$

При таком подходе все три выражения (210.7) также представляют собой операторы. Их собственные значения определяются формулами

$$W = \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}} E_{\mathbf{k}}, \quad E_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}; \quad (210.9a)$$

$$P = \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}} \mathbf{p}_{\mathbf{k}}, \quad \mathbf{p}_{\mathbf{k}} = \hbar \mathbf{k}; \quad (210.9b)$$

$$Q = e \sum_{\mathbf{k}} N_{\mathbf{k}}. \quad (210.9b)$$

Этот набор собственных значений описывает состояния системы невзаимодействующих частиц, из которых $N_{\mathbf{k}}$ находятся в состоянии \mathbf{k} и соответственно имеют энергию $E_{\mathbf{k}}$, импульс $\mathbf{p}_{\mathbf{k}}$ и заряд e .

Чтобы квантование приводило к требуемым собственным значениям (210.8), операторы $c_{\mathbf{k}}$ и $c_{\mathbf{k}}^\dagger$ должны удовлетворять следующие

щим перестановочным соотношениям¹⁾:

$$\begin{aligned} [c_k, c_{k'}^\dagger]_- &\equiv c_k c_{k'}^\dagger - c_{k'}^\dagger c_k = \delta_{kk'} \text{ в случае статистики Бозе,} \\ [c_k, c_{k'}^\dagger]_+ &\equiv c_k c_{k'}^\dagger + c_{k'}^\dagger c_k = \delta_{kk'} \text{ в случае статистики Ферми.} \end{aligned} \quad (210.10)^2$$

Отсюда, как нетрудно проверить, следует, что перестановочные соотношения для волновых операторов должны иметь вид

$$\begin{aligned} [\psi(\mathbf{r}, t), \psi^\dagger(\mathbf{r}', t)]_\pm &= \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_k \sum_{k'} [c_k, c_{k'}^\dagger]_\pm e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \mathbf{k}'\mathbf{r}') - i(\omega - \omega')t} = \\ &= \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (210.11)$$

Задача 211. Рассеяние в борновском приближении

Примените развитую выше теорию квантования шредингеровского волнового поля к задаче об упругом рассеянии частиц на сферически симметричном потенциале $V(r)$.

Решение. Пусть квантованное свободное поле, рассмотренное в предыдущей задаче, возмущается потенциалом $V(r)$. Это значит, что к гамильтониану поля W мы должны добавить оператор энергии возмущения

$$W' = \int \psi^\dagger V \psi d^3x. \quad (211.1)$$

Если ограничиться первым приближением, то вместо ψ и ψ^\dagger мы можем подставить в оператор W' суперпозицию плоских волн (210.5). Таким образом имеем

$$W' = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_k \sum_{k'} c_{k'}^\dagger c_k \int V(r) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{r}} \cdot e^{i(\omega' - \omega)t} d^3x. \quad (211.2)$$

Интеграл (211.2) хорошо нам знаком по борновской теории рассеяния (см. задачу 105). Вводя здесь, как обычно, переданный импульс

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \mathbf{K}, \quad (211.3)$$

¹⁾ В этой главе мы пользуемся обозначением

$$[a, b] = ab - ba,$$

которое отличается множителем i/\hbar от обозначения, принятого в гл. I.

²⁾ В задаче 31 было показано, что в случае статистики Бозе формулы для собственных значений (210.8) действительно являются следствиями перестановочных соотношений (210.10). Метод, использованный в задаче 31, применим и в случае статистики Ферми.

получаем

$$\langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle = \int V(r) e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} d^3x = 4\pi \int_0^\infty r^2 V(r) \frac{\sin Kr}{Kr} dr \quad (211.4)$$

(заметьте, что это выражение имеет размерность эрг·см³) и, следовательно,

$$W' = \frac{1}{\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'}^\dagger c_{\mathbf{k}} \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k} \rangle e^{i(\omega' - \omega)t}. \quad (211.5)$$

Перейдем теперь к описанию процесса рассеяния. Начальное состояние квантованного поля характеризуется тем, что имеется лишь одна частица в состоянии \mathbf{k}_0 , а все другие одночастичные состояния не заняты. Такое состояние поля описывается гильбертовым вектором

$$\chi_i = |0 \dots 1_{\mathbf{k}_0} \dots 0_{\mathbf{k}_f} \dots \rangle. \quad (211.6a)$$

Конечное состояние поля характеризуется тем, что имеется одна-единственная частица в состоянии \mathbf{k}_f , поэтому

$$\chi_f = |0 \dots 0_{\mathbf{k}_0} \dots 1_{\mathbf{k}_f} \dots \rangle. \quad (211.6b)$$

Чтобы найти вероятность перехода между этими двумя состояниями, мы должны вычислить матричный элемент

$$\langle \chi_f | W' | \chi_i \rangle. \quad (211.7)$$

Пользуясь соотношениями

$$c_{\mathbf{k}} |0_{\mathbf{k}}\rangle = 0, \quad c_{\mathbf{k}} |1_{\mathbf{k}}\rangle = |0_{\mathbf{k}}\rangle,$$

получаем

$$c_{\mathbf{k}} \chi_i = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}_0} |0_{\mathbf{k}_0}\rangle.$$

Таким образом, когда оператор W' , определенный соотношением (211.5), действует на гильбертов вектор χ_i , от суммы по \mathbf{k} остается единственный член с $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, при этом оператор $c_{\mathbf{k}_0}$ уничтожает начальную частицу и превращает исходное состояние поля χ_i в вакуумное состояние $|0\rangle$. Что же касается оставшейся суммы по $c_{\mathbf{k}'}^\dagger$, то в нее дают вклад все члены, и с учетом соотношения

$$c_{\mathbf{k}'}^\dagger |0\rangle = |1_{\mathbf{k}'}\rangle$$

ее можно записать в виде

$$W' |1_{\mathbf{k}_0}\rangle = \frac{1}{\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{k}'} \langle \mathbf{k}' | V | \mathbf{k}_0 \rangle e^{i(\omega' - \omega_0)t} |1_{\mathbf{k}'}\rangle.$$

В силу условий ортонормированности

$$\langle \chi_f | 1_{k'} \rangle = \langle 1_{k_f} | 1_{k'} \rangle = \delta_{k_f k'},$$

в матричный элемент (211.7) дает вклад также только один член этой последней суммы, и мы получаем

$$\langle \chi_f | W' | \chi_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}^2} \langle k_f | V | k_0 \rangle e^{i(\omega' - \omega_0)t}. \quad (211.8)$$

Зная матричный элемент, можно с помощью „золотого правила“ вычислить дифференциальное сечение рассеяния:

$$d\sigma = \frac{2\pi}{\hbar} \rho_f |\langle \chi_f | W' | \chi_i \rangle|^2 \frac{\mathcal{V}^2}{v}, \quad (211.9)$$

где

$$\rho_f = \frac{\mathcal{V}^2 p^2 dp d\Omega}{(2\pi\hbar)^3 dE} = \frac{m^2 v \mathcal{V}^2}{8\pi^3 \hbar^3} d\Omega, \quad (211.10)$$

причем в последнем выражении все величины отбросятся к конечному состоянию. Если теперь подставить выражение (211.10) в (211.9) и воспользоваться для матричного элемента формулой (211.8), то объем куба периодичности \mathcal{V}^2 сократится и мы получим

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 |\langle k_f | V | k_0 \rangle|^2. \quad (211.11)$$

Этот результат с учетом выражения (211.4) полностью согласуется с формулой первого борновского приближения (см. задачи 105 и 184).

Задача 212. Квантование классического поля излучения

Пользуясь классическими выражениями для энергии и импульса максвелловского поля в вакууме, произвести квантование этого поля в соответствии со статистикой Бозе. Считать, что внутри куба объемом $\mathcal{V}^2 = L^3$ на поле наложено условие периодичности.

Решение. Классическое поле излучения описывается векторным потенциалом \mathbf{A} , удовлетворяющим дифференциальным уравнениям

$$\square \mathbf{A} = 0 \quad \text{и} \quad \text{div} \mathbf{A} = 0, \quad (212.1)$$

из которых при обычной калибровке следует поперечность электромагнитных волн. Чтобы придать физический смысл этим уравнениям, надо либо ввести соотношения, связывающие векторный потенциал \mathbf{A} с напряженностями электрического и маг-

нитного полей,

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{c} \dot{\mathbf{A}}, \quad \mathfrak{H} = \text{rot } \mathbf{A}, \quad (212.2)$$

либо рассмотреть выражения для энергии и импульса поля:

$$W = \frac{1}{8\pi} \int (\mathcal{E}^2 + \mathfrak{H}^2) d^3x = \frac{1}{8\pi} \int \left[\frac{1}{c^2} \dot{\mathbf{A}}^2 + (\text{rot } \mathbf{A})^2 \right] d^3x \quad (212.3)$$

и

$$\mathbf{P} = \frac{1}{4\pi c} \int [\mathcal{E} \cdot \mathfrak{H}] d^3x = -\frac{1}{4\pi c^2} \int [\dot{\mathbf{A}} \cdot \text{rot } \mathbf{A}] d^3x. \quad (212.4)$$

Общее решение дифференциальных уравнений (212.1) можно, как обычно, представить в виде суперпозиции плоских волн

$$\mathbf{A} = \sqrt{\frac{4\pi c^2}{\mathcal{V}^2}} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} (q_{\mathbf{k}\lambda} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + q_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}), \quad (212.5)$$

где $\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}$ — единичный вектор, а индекс $\lambda = 1, 2$ отвечает двум состояниям поперечной поляризации. Векторы $\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}$ должны удовлетворять трем условиям ортогональности:

$$(\mathbf{u}_{\mathbf{k}1} \cdot \mathbf{k}) = (\mathbf{u}_{\mathbf{k}2} \cdot \mathbf{k}) = (\mathbf{u}_{\mathbf{k}1} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}2}) = 0. \quad (212.6)$$

Выбор нормировочного множителя перед знаком суммы в выражении (212.5) продиктован соображениями удобства. В силу условия периодичности внутри куба объемом $\mathcal{V} = L^3$ значения волнового вектора \mathbf{k} определяются равенством

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L} \mathbf{n}, \quad (212.7)$$

где $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Частота волны ω связана с абсолютной величиной волнового вектора k законом дисперсии

$$\omega = kc. \quad (212.8)$$

Так как каждое слагаемое в сумме (212.5) состоит из двух комплексно-сопряженных по отношению друг к другу членов, то векторный потенциал \mathbf{A} представляет собой действительную функцию переменных \mathbf{r} и t , как это и должно быть в классической теории Максвелла.

Подставляя общее решение (212.5) в выражение для энергии (212.3), получаем

$$W = \frac{c^2}{2\mathcal{V}^2} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sum_{\mathbf{k}'\lambda'} \int \left\{ -\frac{\omega\omega'}{c^2} \mathbf{u}_{\mathbf{k}'\lambda'} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda} - [\mathbf{k}' \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}'\lambda'}] [\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}] \right\} \times \\ \times \{ q_{\mathbf{k}'\lambda'} e^{i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega't)} - q_{\mathbf{k}'\lambda'}^* e^{-i(\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}-\omega't)} \} \{ q_{\mathbf{k}\lambda} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} - q_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \} d^3x.$$

Если теперь перемножить выражения, стоящие в двух последних скобках, то после интегрирования по пространству у нас оста-

нются только те члены с произведениями qq и q^*q^* , в которых $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$, и только те члены с произведениями qq^* и q^*q , в которых $\mathbf{k}' = \mathbf{k}$. В результате выражение, фигурирующее в первой скобке, если еще учесть соотношения (212.6), примет вид

$$-\frac{\omega^2}{c^2} (\mathbf{k}' \cdot \mathbf{k}) = \begin{cases} 0, & \text{если } \mathbf{k}' = -\mathbf{k}, \\ -2\frac{\omega^2}{c^2} \delta_{\lambda\lambda'}, & \text{если } \mathbf{k}' = +\mathbf{k}. \end{cases}$$

Таким образом, получаем

$$W = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega^2 (q_{\mathbf{k}\lambda} q_{\mathbf{k}\lambda}^* + q_{\mathbf{k}\lambda}^* q_{\mathbf{k}\lambda}). \quad (212.9)$$

С помощью аналогичных выкладок нетрудно показать, что выражение для импульса (212.4) приводится к виду

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega \mathbf{k} (q_{\mathbf{k}\lambda} q_{\mathbf{k}\lambda}^* + q_{\mathbf{k}\lambda}^* q_{\mathbf{k}\lambda}). \quad (212.10)$$

Теперь можно приступить к квантованию классического поля излучения, заменив классические амплитуды $q_{\mathbf{k}\lambda}$ и $q_{\mathbf{k}\lambda}^*$ операторами $q_{\mathbf{k}\lambda}$ и $q_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$, которые удобно записать в виде

$$q_{\mathbf{k}\lambda} = C_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}\lambda} \quad \text{и} \quad q_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger = C_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger, \quad (212.11)$$

где $C_{\mathbf{k}}$ — действительные нормировочные множители. Мы имеем

$$\begin{aligned} W &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega^2 C_{\mathbf{k}}^2 (b_{\mathbf{k}\lambda} b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{k}\lambda}), \\ \mathbf{P} &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \omega \mathbf{k} C_{\mathbf{k}}^2 (b_{\mathbf{k}\lambda} b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger + b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{k}\lambda}). \end{aligned} \quad (212.12)$$

В соответствии со статистикой Бозе подчиним операторы $b_{\mathbf{k}\lambda}$ и $b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$ перестановочным соотношениям

$$b_{\mathbf{k}\lambda} b_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger - b_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger b_{\mathbf{k}\lambda} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (212.13)$$

и будем считать, что все другие комбинации этих операторов коммутативны. В силу указанных перестановочных соотношений собственные значения операторов $b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger b_{\mathbf{k}\lambda}$, обозначаемые ниже через $N_{\mathbf{k}\lambda}$, оказываются целочисленными:

$$N_{\mathbf{k}\lambda} = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (212.14)$$

при этом собственные значения операторов $b_{\mathbf{k}\lambda} b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$ будут равны $N_{\mathbf{k}\lambda} + 1$ (см. задачу 31). Если далее положить

$$C_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}, \quad (212.15)$$

то выражения для операторов энергии и импульса (212.12) примут вид

$$\begin{aligned} W &= \sum_{\kappa\lambda} \frac{\hbar\omega}{2} (b_{\kappa\lambda} b_{\kappa\lambda}^\dagger + b_{\kappa\lambda}^\dagger b_{\kappa\lambda}), \\ P &= \sum_{\kappa\lambda} \hbar\mathbf{k} (b_{\kappa\lambda} b_{\kappa\lambda}^\dagger + b_{\kappa\lambda}^\dagger b_{\kappa\lambda}), \end{aligned} \quad (212.16)$$

а их собственные значения будут равны

$$W = \sum_{\kappa\lambda} \hbar\omega (N_{\kappa\lambda} + 1/2) \quad \text{и} \quad P = \sum_{\kappa\lambda} \hbar\mathbf{k} (N_{\kappa\lambda} + 1/2). \quad (212.17)$$

Таким образом, мы можем интерпретировать величину $N_{\kappa\lambda}$ как число фотонов в состоянии с квантовыми числами \mathbf{k} и λ , причем в указанном состоянии каждый фотон обладает энергией $\hbar\omega$, а его импульс направлен вдоль вектора \mathbf{k} и равен по величине $\hbar k = \hbar\omega/c$.

Из (212.1) следует, что вакуум обладает энергией

$$W_0 = \sum_{\kappa\lambda} \frac{\hbar\omega}{2} \quad (212.18)$$

(энергия нулевых колебаний поля). Несмотря на то что энергия вакуума бесконечна, ей не следует придавать особого физического смысла. Фактически можно ограничиться рассмотрением разности энергий реального состояния и вакуума

$$W - W_0 = \sum_{\kappa\lambda} \hbar\omega N_{\kappa\lambda}, \quad (212.19)$$

которая всегда конечна. Вклад же нулевых колебаний поля в импульс равен нулю, так как члены суммы (212.17) с \mathbf{k} и $-\mathbf{k}$ попарно сокращаются.

В результате квантования векторный потенциал A становится оператором, порождающим и уничтожающим фотоны. С помощью соотношений (212.5), (212.11) и (212.15) нетрудно показать, что в квантовой теории выражение для векторного потенциала имеет вид

$$A = \sum_{\kappa\lambda} \sqrt{\frac{2\pi c \hbar}{\omega \mathcal{V} k}} \{ b_{\kappa\lambda} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} + b_{\kappa\lambda}^\dagger e^{-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \} \mathbf{u}_{\kappa\lambda}. \quad (212.20)$$

Задача 213. Вероятность переходов с излучением одного фотона

Электрон помещен в сферически симметричное поле $V(r)$. Вычислить вероятность перехода электрона с верхнего уровня на нижний, если этот переход сопровождается излучением одного фотона. Эффекты запаздывания не учитывать.

Решение. В классической теории Максвелла взаимодействие вещества (электрон) с излучением описывается выражением

$$H' = \frac{1}{c} \int (\mathbf{A} \cdot \mathbf{j}) d^3x, \quad (213.1)$$

где \mathbf{A} — векторный потенциал поля излучения, а \mathbf{j} — плотность электрического тока частиц вещества. В теории квантованных полей векторный потенциал, согласно результатам задачи 212, записывается в виде ¹⁾

$$\mathbf{A} = \sum_{k\lambda} \sqrt{\frac{2\pi c \hbar}{k^3 \gamma^2}} \mathbf{u}_k^{(\lambda)} (b_{k\lambda} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + b_{k\lambda}^\dagger e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}). \quad (213.2)$$

Выражение для плотности электрического тока можно написать, воспользовавшись результатами квантования шредингеровского поля. Имеем

$$\psi = \sum_n c_n u_n(\mathbf{r}), \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 u_n + V u_n = E_n u_n. \quad (213.3)$$

Отсюда с помощью формулы

$$\mathbf{j} = -\frac{e\hbar}{2mi} (\psi^\dagger \nabla \psi - \nabla \psi^\dagger \cdot \psi)$$

(заряд электрона равен $-e$) получаем

$$\mathbf{j} = -\frac{e\hbar}{2mi} \sum_n \sum_{n'} (u_{n'}^* \nabla u_n - u_n \nabla u_{n'}^*) c_n^\dagger c_n. \quad (213.4)$$

Здесь $u_n(\mathbf{r})$ и $u_{n'}^*(\mathbf{r})$ — одночастичные волновые функции, явный вид которых можно найти путем решения уравнения (213.3); индекс n (или n') фактически означает совокупность трех квантовых чисел. Величины c_n и c_n^\dagger являются операторами, введенными в задаче 210, и подчиняются перестановочным соотношениям

$$\begin{aligned} c_n c_{n'}^\dagger + c_{n'}^\dagger c_n &= \delta_{nn'}, \\ c_n c_{n'} + c_{n'} c_n &= 0. \end{aligned} \quad (213.5)$$

Спонтанное излучение фотона происходит в процессе перехода электрона из начального состояния n_i в конечное состояние n_f . На языке теории квантованного шредингеровского поля это означает, что электрон, находящийся в начальном состоянии n_i , уничтожается, а вместо него рождается электрон в конечном

¹⁾ В выражениях (213.2) и (213.3) мы опустили временные множители, фигурировавшие в выражениях (212.20) и (210.5). Это соответствует переходу от картины Шредингера к картине Гейзенберга.

состоянии n_f . В то же самое время происходит рождение фотона в состоянии (\mathbf{k}, λ) . Указанный процесс описывается тем членом в энергии взаимодействия, который содержит произведение операторов

$$b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger c_{n_f}^\dagger c_{n_i}$$

Если подставить выражения (213.2) и (213.4) в энергию взаимодействия (213.1), то легко убедиться, что в ней такой член действительно имеется и его можно записать в виде

$$\langle f | H' | i \rangle b_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger c_{n_f}^\dagger c_{n_i}, \quad (213.6a)$$

где

$$\langle f | H' | i \rangle = \frac{1}{c} \int \sqrt{\frac{2\pi c \hbar}{k \mathcal{V}^2}} \frac{e \hbar}{2m} i e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\lambda)} (u_{n_f}^* \nabla u_{n_i} - u_{n_i} \nabla u_{n_f}^*) d^3x \quad (213.6b)$$

— обычный матричный элемент перехода между начальным и конечным состояниями. Вероятность интересующего нас перехода можно записать с помощью золотого правила (см. задачу 183):

$$P = \frac{2\pi}{\hbar} \rho_f |\langle f | H' | i \rangle|^2. \quad (213.7)$$

В энергетической шкале плотность конечных состояний ρ_f полностью определяется фотонами:

$$\rho_f = \frac{k^2 dk d\Omega_{\mathbf{k}} \mathcal{V}^2}{(2\pi)^3 \hbar c dk} = \frac{\mathcal{V}^2}{8\pi^3 \hbar c} k^2 d\Omega_{\mathbf{k}}, \quad (213.8)$$

где $d\Omega_{\mathbf{k}}$ — элемент телесного угла, в который вылетает испущенный фотон.

Таким образом, остается лишь вычислить интеграл

$$I = \int e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (u_{n_f}^* \nabla u_{n_i} - u_{n_i} \nabla u_{n_f}^*) d^3x,$$

фигурирующий в формуле (213.6b). Если длина волны излучаемого атомом света велика по сравнению с его размерами, то эффектами запаздывания можно пренебречь, так как в этом случае множитель $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ в подынтегральном выражении с хорошей степенью точности можно заменить единицей. Интегрируя далее второй член по частям, получаем

$$I = 2 \int u_{n_f}^* \nabla u_{n_i} d^3x.$$

С помощью уравнений Шредингера для функций u_{n_i} и $u_{n_f}^*$ нетрудно вывести тождество (см. задачу 187)

$$I = \frac{2m}{\hbar^2} (E_i - E_f) \int u_{n_f}^* \mathbf{r} u_{n_i} d^3x.$$

Если теперь еще учесть закон сохранения энергии

$$E_i - E_f = \hbar\omega,$$

то матричный элемент (213.6б) можно записать в виде

$$\langle f | H' | i \rangle = \frac{e}{c} i \sqrt{\frac{2\pi c \hbar}{k \gamma^2}} \omega \langle f | (\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{r}) | i \rangle, \quad (213.9)$$

где

$$\langle f | (\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{r}) | i \rangle = \int u_{n_f}^*(\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{r}) u_{n_i} d^3x. \quad (213.10)$$

После подстановки выражений (213.8) и (213.9) в формулу (213.7) окончательно получаем

$$P_{k, \lambda} = \frac{d\Omega_k}{2\pi} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\omega^3}{c^2} |\langle f | (\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{r}) | i \rangle|^2. \quad (213.11a)$$

Последнее выражение можно представить в более привычной форме, введя вместо ω частоту $\nu = \omega/2\pi$

$$P_{k, \lambda} = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{4\pi^2 \nu^3}{c^2} d\Omega_k |\langle f | (\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{r}) | i \rangle|^2. \quad (213.11b)$$

Фигурирующий здесь матричный элемент удобно записать в виде произведения

$$\langle f | (\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{r}) | i \rangle = (\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{r}_{if}), \quad (213.12)$$

в котором первый сомножитель зависит только от направления вылета и поляризации излучаемого фотона, а второй полностью определяется внутренними параметрами излучающего атома.

Задача 214. Угловое распределение излучения

Пользуясь формулами предыдущей задачи, проанализировать угловое распределение фотонов, испускаемых при переходе электрона из P -состояния в S -состояние.

Решение. Обозначим через Θ и Φ сферические углы вектора \mathbf{k} . Определим далее два состояния поляризации, выбрав вектор $\mathbf{u}_k^{(1)}$ в меридиональной плоскости, а вектор $\mathbf{u}_k^{(2)}$ — перпендикулярно к ней. Эти единичные векторы имеют следующие

компоненты:

$$u_x^{(1)} = \cos \Theta \cos \Phi, \quad u_y^{(1)} = \cos \Theta \sin \Phi, \quad u_z^{(1)} = -\sin \Theta \quad (214.1a)$$

и

$$u_x^{(2)} = -\sin \Phi, \quad u_y^{(2)} = \cos \Phi, \quad u_z^{(2)} = 0. \quad (214.1b)$$

Чтобы получить компоненты вектора \mathbf{r}_{if} , мы прежде всего выразим компоненты радиус-вектора \mathbf{r} через сферические гармоники:

$$\begin{aligned} x &= r \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (Y_{1,1} + Y_{1,-1}), \\ y &= -ir \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (Y_{1,1} - Y_{1,-1}), \\ z &= r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1,0}. \end{aligned} \quad (214.2)$$

Запишем теперь матричные элементы этих компонент для перехода между двумя электронными состояниями

$$|i\rangle = v(r) Y_{1,m}(\vartheta, \varphi) \quad \text{и} \quad |f\rangle = u(r) Y_{0,0}(\vartheta, \varphi). \quad (214.3)$$

Замечая далее, что $Y_{0,0} = (4\pi)^{-1/2}$ есть попросту постоянная, получаем

$$\begin{aligned} x_{if} &= \frac{1}{\sqrt{6}} R (\delta_{m,1} + \delta_{m,-1}), \\ y_{if} &= -\frac{1}{\sqrt{6}} R (\delta_{m,1} - \delta_{m,-1}), \\ z_{if} &= \frac{1}{\sqrt{3}} R \delta_{m,0}, \end{aligned} \quad (214.4)$$

где через R обозначен радиальный интеграл:

$$R = \int_0^{\infty} u^*(r) v(r) r^3 dr = \sqrt{3} |r_{if}|. \quad (214.5)$$

Согласно формуле (213.11a), вероятность излучения фотона с поляризацией λ в телесный угол $d\Omega_k$ имеет вид

$$P_{k\lambda} = \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} \frac{d\Omega_k}{2\pi} |(\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{r}_{if})|^2. \quad (214.6)$$

С учетом выражений (214.1a) и (214.1b) для векторов $\mathbf{u}_k^{(\lambda)}$ и выражения (214.4) для вектора \mathbf{r}_{if} скалярное произведение $(\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{r}_{if})$

в случае $\lambda = 1$ записывается в виде

$$\begin{aligned} \text{при } m = +1: & \quad \frac{R}{\sqrt{6}} \cos \Theta e^{-i\Phi}, \\ \text{при } m = 0: & \quad -\frac{R}{\sqrt{3}} \sin \Theta, \\ \text{при } m = -1: & \quad \frac{R}{\sqrt{6}} \cos \Theta e^{i\Phi}. \end{aligned} \quad (214.7)$$

Если же $\lambda = 2$, то мы имеем

$$\begin{aligned} \text{при } m = +1: & \quad -i \frac{R}{\sqrt{6}} e^{-i\Phi}, \\ \text{при } m = 0: & \quad 0, \\ \text{при } m = -1: & \quad +i \frac{R}{\sqrt{6}} e^{i\Phi} \end{aligned} \quad (214.8)$$

и, следовательно,

$$P_{k, \lambda} = \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} \cdot \frac{R^2}{6\pi} d\Omega_k D_{k\lambda}(\Theta, \Phi). \quad (214.9)$$

Значения „диаграммы направленности“ $D_{k\lambda}$ приводятся в таблице.

Диаграмма направленности $D_{k\lambda}$ для

m	$\lambda=1$	$\lambda=2$
+1	$\frac{1}{2} \cos^2 \Theta$	$\frac{1}{2}$
0	$\sin^2 \Theta$	0
-1	$\frac{1}{2} \cos^2 \Theta$	$\frac{1}{2}$

В случае $\lambda = 2$ излучение фотона в любом направлении равновероятно, но из начального состояния с $m = 0$ фотоны такой поляризации не излучаются вообще. Таким образом, распад P -состояния с $m = 0$ происходит только путем излучения фотона с поляризацией $\lambda = 1$, причем угловое распределение фотонов характеризуется в этом случае множителем $\sin^2 \Theta$, и, следовательно, для $m = 0$ они в основном испускаются в экваториальной плоскости ($\Theta = 90^\circ$). Если же $\lambda = 1$ и $m = \pm 1$, то угловое распределение характеризуется множителем $\cos^2 \Theta$ и фотоны в основном испускаются в направлениях $\Theta = 0^\circ$ и $\Theta = 180^\circ$.

Задача 215. Полная вероятность перехода

Электрон переходит с верхнего p -уровня на нижний s -уровень, испуская при этом один фотон. Выяснить, какова вероятность указанного перехода безотносительно к направлению испускания фотона и его поляризации. В качестве примера рассчитать среднее время жизни атома водорода в возбужденном $2p$ -состоянии.

Решение. В предыдущей задаче была рассчитана дифференциальная вероятность излучения фотона в элемент телесного угла $d\Omega_k$ в направлении Θ , Φ для случаев $m = +1, 0, -1$ и обоих состояний поляризации. С помощью этих формул после суммирования по состояниям поляризации получаем

$$\sum_{\lambda} P_{k\lambda} = \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} \frac{R^2}{6\pi} d\Omega_k \sin^2 \Theta \quad \text{для } m = 0, \quad (215.1a)$$

$$\sum_{\lambda} P_{k\lambda} = \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} \frac{R^2}{6\pi} d\Omega_k \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \Theta) \quad \text{для } m = \pm 1. \quad (215.1b)$$

После интегрирования по направлениям вылета фотонов для вероятности перехода из p -состояния в s -состояние независимо от значений квантового числа m получается одно и то же выражение:

$$P = \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} \frac{R^2}{6\pi} \frac{8\pi}{3} = \frac{4e^2 \omega^3}{9\hbar c^3} R^2. \quad (215.2)$$

Выражение для радиального интеграла R было определено в предыдущей задаче, поэтому теперь можно приступить непосредственно к рассмотрению примера. Атом водорода, находящийся в возбужденном $2p$ -состоянии, может перейти лишь в основное $1s$ -состояние. В атомных единицах (\hbar^2/me^2 является единицей длины) волновые функции этих двух состояний записываются в виде

$$|i\rangle = \frac{1}{12} \sqrt{6} r e^{-r/2} Y_{1,m} \quad (215.3a)$$

и

$$|f\rangle = 2e^{-r} Y_{0,0}. \quad (215.3b)$$

Таким образом, с учетом выражения (214.5) получаем

$$R = \frac{\sqrt{6}}{12} \cdot 2 \int_0^{\infty} r e^{-r/2} \cdot e^{-r} r^3 dr = \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\frac{2}{3}\right)^5 24; \quad R^2 = \frac{2^{16}}{3^9},$$

или, если вернуться к обычным единицам,

$$R^2 = \frac{2^{15} \hbar^4}{3^9 m^2 e^4}. \quad (215.4)$$

Частоту излучаемого света ω можно определить из формулы энергетических уровней атома водорода:

$$\omega = \frac{3 m e^4}{8 \hbar^3}. \quad (215.5)$$

Подставляя теперь выражения (215.4) и (215.5) для R^2 и ω в формулу (215.2), после некоторой перегруппировки множителей находим

$$P = \left(\frac{2}{3}\right)^8 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^8 \frac{m e^4}{\hbar^8}. \quad (215.6)$$

Величина, обратная этой вероятности перехода, имеет смысл среднего времени жизни τ возбужденного $2p$ -состояния атома водорода. Имеем

$$\tau = \left(\frac{3}{2}\right)^8 \left(\frac{\hbar c}{e^2}\right)^8 \frac{\hbar^8}{m e^4}. \quad (215.7)$$

Множитель

$$\frac{\hbar^8}{m e^4} = 2,4187 \times 10^{-17} \text{ с} \quad (215.8)$$

можно рассматривать в качестве удобной единицы времени, коль скоро дело касается времен жизни возбужденных состояний атома. Множитель

$$\frac{\hbar c}{e^2} = 137,0373$$

представляет собой величину, обратную постоянной тонкой структуры. Таким образом, числовое значение среднего времени жизни $2p$ -состояния атома водорода оказывается равным

$$\tau = 1,5953 \times 10^{-9} \text{ с}.$$

Задача 216. Правила отбора для дипольного излучения

Если длина волны излучаемого света велика по сравнению с размерами атома, то вероятность перехода между двумя одноэлектронными состояниями, как было показано в задаче 213, зависит от матричного элемента электрического дипольного момента. Получить отсюда правила отбора для дипольного излучения и рассмотреть вытекающие из этих правил следствия в случае нормального эффекта Зеемана.

Решение. Согласно (213.116), в дипольном приближении вероятность излучения фотона с поляризацией λ в элемент телесного угла $d\Omega_{\mathbf{k}}$ в направлении вектора \mathbf{k} имеет вид

$$P_{\mathbf{k}, \lambda} = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{4\pi^2 v^3}{c^2} d\Omega_{\mathbf{k}} |\langle f | (\mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\lambda)} \cdot \mathbf{r}) | i \rangle|^2. \quad (216.1)$$

Здесь $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\lambda)}$ — единичный вектор, характеризующий поляризацию. Если обозначить сферические углы вектора \mathbf{k} через Θ и Φ , то в соответствии с формулами (214.1a) и (214.1б)

$$u_x^{(1)} = \cos \Theta \cos \Phi, \quad u_y^{(1)} = \cos \Theta \sin \Phi, \quad u_z^{(1)} = -\sin \Theta \quad (216.2a)$$

и

$$u_x^{(2)} = -\sin \Phi, \quad u_y^{(2)} = \cos \Phi, \quad u_z^{(2)} = 0. \quad (216.2б)$$

Состояния атома описываются волновыми функциями

$$|i\rangle = \varphi_i(r) Y_{l, m}(\vartheta, \varphi), \quad \langle f| = \varphi_f(r) Y_{l', m'}^*(\vartheta, \varphi),$$

так что для матричного элемента радиус-вектора \mathbf{r} можно написать

$$\begin{aligned} \langle f | x \pm iy | i \rangle &= \int_0^\infty dr r^3 \varphi_i \varphi_f \oint Y_{l', m'}^* Y_{l, m} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi} d\Omega, \\ \langle f | z | i \rangle &= \int_0^\infty dr r^3 \varphi_i \varphi_f \oint Y_{l', m'}^* Y_{l, m} \cos \vartheta d\Omega. \end{aligned} \quad (216.3)$$

Интегралы по угловым переменным легко вычисляются, если принять во внимание соотношения

$$\begin{aligned} \sin \vartheta e^{\pm i\varphi} Y_{l, m} &= \pm A_{l+1, \pm m+1} Y_{l+1, m\pm 1} \mp A_{l, \mp m} Y_{l-1, m\pm 1}, \\ \cos \vartheta Y_{l, m} &= B_{l+1, m} Y_{l+1, m} + B_{l, m} Y_{l-1, m}, \end{aligned} \quad (216.4)$$

где

$$\begin{aligned} A_{l, m} &= \sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l+1)(2l-1)}}, \\ B_{l, m} &= \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}. \end{aligned} \quad (216.5)$$

В результате имеем

$$\langle f | x \pm iy | i \rangle = R_{if} (\pm A_{l+1, \pm m+1} \delta_{l', l+1} \delta_{m', m\pm 1} \mp A_{l, \mp m} \delta_{l', l-1} \delta_{m', m\pm 1}), \quad (216.6a)$$

$$\langle f | z | i \rangle = R_{if} (B_{l+1, m} \delta_{l', l+1} + B_{l, m} \delta_{l', l-1}) \delta_{m', m}, \quad (216.6б)$$

где через R_{if} обозначен радиальный интеграл

$$R_{if} = \int_0^\infty r^3 \varphi_i(r) \varphi_f(r) dr. \quad (216.7)$$

Все матричные элементы обращаются в нуль, за исключением случая $l' = l \pm 1$. Это и есть первое основное правило отбора для дипольных переходов. Далее мы видим, что матричные элементы $x \pm iy$ отличны от нуля только при $m' = m \pm 1$, а матричные элементы z — только при $m' = m$. Другие изменения квантовых чисел l и m при дипольных переходах запрещены.

Комбинируя полученные правила отбора с выражениями (216.2а) и (216.2б), можно рассчитать матричные элементы

$$\langle f | (\mathbf{u}_k^\lambda \cdot \mathbf{r}) | i \rangle,$$

фигурирующие в формуле (216.1) для обоих состояний поляризации $\lambda = 1$ и $\lambda = 2$. Результаты таких расчетов приводятся в следующей таблице:

m'	λ	$l' = l + 1$	$l' = l - 1$
$m + 1$	1	$\frac{1}{2} \cos \Theta e^{-i\Phi} R_{if} A_{l+1, m+1}$	$-\frac{1}{2} \cos \Theta e^{-i\Phi} R_{if} A_{l, -m}$
	2	$-\frac{i}{2} e^{-i\Phi} R_{if} A_{l+1, m+1}$	$\frac{i}{2} e^{-i\Phi} R_{if} A_{l, -m}$
m	1	$-\sin \Theta R_{if} B_{l+1, m}$	$-\sin \Theta R_{if} B_{l, m}$
	2	0	0
$m - 1$	1	$-\frac{1}{2} \cos \Theta e^{i\Phi} R_{if} A_{l+1, -m+1}$	$\frac{1}{2} \cos \Theta e^{i\Phi} R_{if} A_{l, m}$
	2	$-\frac{i}{2} e^{i\Phi} R_{if} A_{l+1, -m+1}$	$\frac{i}{2} e^{i\Phi} R_{if} A_{l, m}$

Если излучающий атом не имеет определенной ориентации в пространстве, то на опыте мы наблюдаем излучение, усредненное по начальной ориентации атома. Если же атом ориентирован вполне определенным образом, как при эффекте Зеемана, то можно получить более детальную информацию. В этом случае направление полярной оси сферической системы координат ($\Theta = 0$) совпадает с направлением магнитного поля. Если мы наблюдаем испускание света в направлении поля, то матричные элементы для перехода $m' = m$ равны нулю и наблюдаются лишь спектральные линии, соответствующие переходам, для которых $m' = m + 1$ и $m' = m - 1$. С другой стороны, для любого направления, перпендикулярного полю, $\cos \Theta = 0$, поэтому при переходах, для которых $m' = m \pm 1$, появляется спектральная линия с поляризацией $\lambda = 2$, а при переходах, для которых $m' = m$, — спектральная линия с поляризацией $\lambda = 1$.

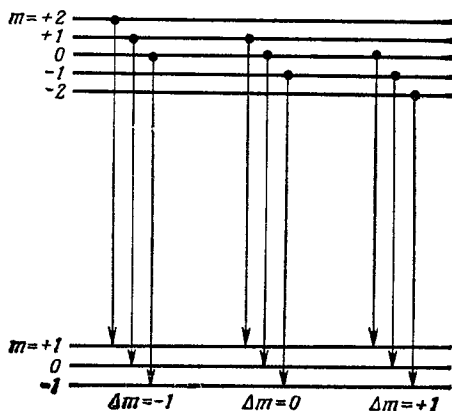
В качестве примера разберем зеемановские переходы из D -состояния (5 компонент) в P -состояние (3 компоненты). Если в отсутствие магнитного поля излучается спектральная линия с частотой ω_0 , то при наличии магнитного поля излучение (фиг. 74) может происходить на трех частотах:

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \omega_0 + \omega_L & \text{при } m' = m - 1, \\ \omega_0 & & \text{при } m' = m, \\ \omega_{-1} &= \omega_0 - \omega_L & \text{при } m' = m + 1, \end{aligned}$$

где

$$\omega_L = \frac{e\mathcal{H}}{2mc}.$$

Если наблюдение излучения производится в направлении поля ($\Theta=0$), то средняя линия (ω_0) отсутствует и мы имеем дублет



Фиг. 74. Зеемановские переходы $D \rightarrow P$.

В соответствии с правилом $\Delta m = +1, 0, -1$ спектральные линии имеют различную поляризацию.

с частотами $\omega_0 + \omega_L$ и $\omega_0 - \omega_L$. В направлении же, перпендикулярном магнитному полю, наблюдаются все три составляющие нормального зеемановского триплета, но его компоненты относятся к различным состояниям поляризации.

Задача 217. Интенсивности линий лаймановской серии

Сравнить интенсивности двух первых линий серии Лаймана, $Ly\alpha$ и $Ly\beta$, в спектре излучения атома водорода.

Решение. Мы должны рассмотреть два перехода:

$$Ly\alpha: 2p \rightarrow 1s \text{ и } Ly\beta: 3p \rightarrow 1s.$$

Вероятность излучения, проинтегрированная по всем направлениям и просуммированная по обоим состояниям поляризации, имеет вид

$$P = \frac{4}{3} \frac{e^2 \omega^3}{\hbar c^3} |\langle f | \mathbf{r} | i \rangle|^2. \quad (217.1)$$

Интенсивность спектральной линии (т. е. энергия, излучаемая в 1 с) пропорциональна произведению ωP , поэтому для рассматриваемых линий

$$\frac{I_\alpha}{I_\beta} = \left(\frac{E_\alpha}{E_\beta} \right)^4 \left| \frac{\langle 1s | \mathbf{r} | 2p \rangle}{\langle 1s | \mathbf{r} | 3p \rangle} \right|^2. \quad (217.2)$$

В атомных единицах для энергий соответствующих переходов имеем

$$E_\alpha = \frac{1}{2} - \frac{1}{8} = \frac{3}{8} \quad \text{и} \quad E_\beta = \frac{1}{2} - \frac{1}{18} = \frac{4}{9}. \quad (217.3)$$

Таким образом, остается вычислить два матричных элемента.

Согласно результатам задачи 67, волновая функция конечного состояния записывается в виде

$$|1s\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}, \quad (217.4a)$$

а для волновых функций начальных состояний мы имеем в случае линии $L\alpha$ выражение

$$|2p\rangle = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} r e^{-1/2r} \cos \vartheta, \quad (217.4б)$$

а в случае линии $L\beta$ выражение

$$|3p\rangle = \frac{4}{27\sqrt{2\pi}} \left(r - \frac{1}{6} r^2 \right) e^{-1/3r} \cos \vartheta. \quad (217.4в)$$

Выше для обоих p -состояний мы произвольно положили $m=0$. Это отнюдь не ограничивает общности рассмотрения, поскольку мы не собираемся обсуждать эффекты, связанные с ориентацией атома. Радиус-вектор \mathbf{r} имеет компоненты

$$x \pm iy = r \sin \vartheta e^{\pm i\varphi} \quad \text{и} \quad z = r \cos \vartheta.$$

Как непосредственно видно, матричные элементы $x \pm iy$ в результате интегрирования по углу φ обращаются в нуль. Таким образом, остается вычислить лишь матричный элемент $\langle f | z | i \rangle$. Имеем

$$\langle 1s | z | 2p \rangle = \frac{1}{4\pi \sqrt{2}} \oint d\Omega \cos^2 \vartheta \int_0^\infty r^4 e^{-3/2r} dr$$

и

$$\langle 1s | z | 3p \rangle = \frac{4}{27\pi\sqrt{2}} \int d\Omega \cos^2 \vartheta \int_0^\infty r^3 \left(r - \frac{1}{6}r^2\right) e^{-4/3r} dr.$$

Последние интегралы вычисляются элементарно, и мы получаем

$$\langle 1s | z | 2p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{256}{243} \quad \text{и} \quad \langle 1s | z | 3p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{27}{64}. \quad (217.5)$$

Собирая вместе соотношения (217.2), (217.3) и (217.5), окончательно находим

$$\frac{I_\alpha}{I_\beta} = \left(\frac{27}{32}\right)^4 \left(\frac{256}{243} \frac{64}{27}\right)^2 = 0,510 \times 6,23, \quad (217.6)$$

или

$$\frac{I_\alpha}{I_\beta} = 3,18.$$

Замечание. Радиальные матричные элементы для других пар состояний атома водорода приведены в монографии Бете и Солпитера: см. *Bethe H. A., Salpeter E. E.*, в книге: *Encyclopedia of Physics*, Springer, Berlin — Göttingen — Heidelberg, 1957, Vol. 35, § 63 и особенно табл. 13. (Имеется перевод: *Бете Г., Солпитер Э.*, Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами, Физматгиз, 1960, стр. 412—415.— *Прим. ред.*)

Задача 218. Эффект Комптона

Ограничившись нерелятивистской теорией, рассмотреть рассеяние фотона на свободном покоящемся электроне.

Решение. При наличии поля излучения плотность электрического тока шредингеровского поля электронов описывается формулой¹⁾

$$\mathbf{j} = -\frac{e\hbar}{2mi} (\psi^\dagger \nabla \psi - \nabla \psi^\dagger \cdot \psi) - \frac{e^2}{mc} \mathbf{A} \psi^\dagger \psi = \mathbf{j}' + \mathbf{j}'', \quad (218.1)$$

а взаимодействие полей ψ и \mathbf{A} имеет вид

$$W = \frac{1}{c} \int (\mathbf{j} \cdot \mathbf{A}) d^3x = W' + W''. \quad (218.2)$$

Подставив в энергию взаимодействия вместо квантованного шре-

¹⁾ В ранее рассмотренных нами задачах об излучении последний дополнительный член в формуле (218.1) не давал вклада в процесс первого порядка и по этой причине не учитывался.

дингеровского поля ψ выражение

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{V}\rho}} \sum_q c_q e^{iq \cdot r}, \quad (218.3)$$

а вместо квантованного поля излучения выражение

$$A = \sum_{\kappa\lambda} \sqrt{\frac{2\pi c \hbar}{\mathcal{V}\rho k}} u_k^{(\lambda)} (b_{\kappa\lambda} e^{ik \cdot r} + b_{\kappa\lambda}^\dagger e^{-ik \cdot r}), \quad (218.4)$$

легко заметить, что энергия W'' (она возникает из члена с \mathbf{j}'') дает вклад в рассеяние уже в первом порядке теории возмущений, энергия же W' (она возникает из члена с \mathbf{j}') дает вклад в рассеяние лишь во втором порядке теории возмущений. По этой причине мы сосредоточим наше внимание на энергии взаимодействия

$$W'' = -\frac{e^2}{mc^2} \int A^2 \psi^\dagger \psi d^3x, \quad (218.5)$$

Возникновение этого члена в энергии взаимодействия легко объяснимо и с точки зрения классических представлений. Напряженность электрического поля световой волны

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{c} \dot{A},$$

падающей на электрон, приводит его в движение, так что

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -e\mathcal{E} = \frac{e}{c} \dot{A}$$

и, следовательно,

$$\dot{\mathbf{r}} = \frac{e}{mc} A.$$

В результате возникает индуцированная плотность тока

$$\mathbf{j}'' = \rho \dot{\mathbf{r}} = \frac{e}{mc} \rho A,$$

где ρ — плотность заряда. Согласно же теории Максвелла, взаимодействие тока и поля излучения имеет вид

$$W'' = \frac{1}{c} \int (\mathbf{j}'' \cdot \mathbf{A}) d^3x = \frac{e}{mc^2} \int \rho A^2 d^3x.$$

Если сюда подставить выражение

$$\rho = -e\psi^\dagger \psi,$$

то в результате мы приходим к формуле (218.5).

При комптоновском рассеянии начальный фотон, находящийся в состоянии с квантовыми числами \mathbf{k} и λ , и начальный электрон с импульсом $\hbar\mathbf{q}$ уничтожаются и заменяются фотоном в состоя-

нии с квантовыми числами \mathbf{k}' и λ' и электроном с импульсом $\hbar\mathbf{q}'$. Такой процесс в первом порядке теории возмущений описывается тем членом гамильтониана, который содержит комбинацию операторов

$$c_q^\dagger c_q b_{\mathbf{k}'\lambda'}^\dagger b_{\mathbf{k}\lambda}. \quad (218.6)$$

Матричный элемент интересующего нас члена энергии взаимодействия (218.5) имеет вид

$$\langle f | W'' | i \rangle = - \frac{e^2}{mc^2} \int \frac{2\pi c \hbar}{\mathcal{V}^2 \sqrt{k k'}} (\mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\lambda)} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}'}^{(\lambda')}) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{k}' - \mathbf{q}') \cdot \mathbf{r}} d^3x. \quad (218.7)$$

Фигурирующий здесь интеграл не обращается в нуль лишь при условии

$$\mathbf{k} + \mathbf{q} = \mathbf{k}' + \mathbf{q}', \quad (218.8)$$

т. е. в том случае, если в рассматриваемом процессе выполняется закон сохранения импульса. С учетом закона сохранения импульса выражение (218.7) принимает вид

$$\langle f | W'' | i \rangle = - \frac{2\pi e^2 \hbar}{mc^2 \mathcal{V}^2} \cdot \frac{(\mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(\lambda)} \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}'}^{(\lambda')})}{\sqrt{k k'}}. \quad (218.9)$$

Для определения сечения рассеяния воспользуемся золотым правилом. Имеем

$$d\sigma(\mathbf{k}', \lambda') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\mathcal{V}^2}{c} \rho_f |\langle f | W'' | i \rangle|^2, \quad (218.10)$$

где плотность конечных состояний описывается выражением

$$\rho_f = \frac{k'^2 dk' d\Omega' \mathcal{V}^2}{8\pi^3 dE_f}, \quad (218.11)$$

а суммарная энергия фотона и электрона в конечном состоянии имеет вид

$$E_f = \hbar c k' + \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{q}'^2 = \hbar c \left[k' + \frac{1}{2\kappa} (\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{q})^2 \right] \quad (218.12)$$

и

$$\kappa = \frac{mc}{\hbar}.$$

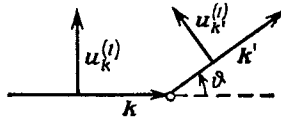
Перейдем теперь к рассмотрению поляризации. На фиг. 75 импульсы фотона \mathbf{k} и \mathbf{k}' до и после рассеяния расположены в плоскости фигуры. Оба вектора $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(1)}$ и $\mathbf{u}_{\mathbf{k}'}^{(1)}$ также лежат в этой плоскости, а векторы $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}^{(2)}$ и $\mathbf{u}_{\mathbf{k}'}^{(2)}$ (на фигуре они не показаны) перпендикулярны к ней. Скалярные произведения, стоящие в выражении (218.9), как следует непосредственно из фиг. 75,

имеют вид

$$(\mathbf{u}_k^{(1)} \cdot \mathbf{u}_{k'}^{(1)}) = \cos \vartheta, \quad (\mathbf{u}_k^{(1)} \cdot \mathbf{u}_{k'}^{(2)}) = 0, \quad (218.13a)$$

$$(\mathbf{u}_k^{(2)} \cdot \mathbf{u}_{k'}^{(1)}) = 0, \quad (\mathbf{u}_k^{(2)} \cdot \mathbf{u}_{k'}^{(2)}) = 1. \quad (218.13b)$$

Поэтому в рассматриваемом процессе возможны лишь те переходы, при которых векторы, характеризующие поляризацию соответственно до и после рассеяния, либо оба лежат в плоско-



Фиг. 75. Эффект Комптона.

Векторы $\mathbf{u}_k^{(1)}$ и $\mathbf{u}_{k'}^{(1)}$, характеризующие поляризацию в начальном состоянии (\mathbf{k}) и конечном состоянии (\mathbf{k}'), расположены в плоскости векторов \mathbf{k} и \mathbf{k}' ; векторы $\mathbf{u}_k^{(2)}$ и $\mathbf{u}_{k'}^{(2)}$ перпендикулярны этой плоскости (на фигуре они не показаны).

сти векторов \mathbf{k} и \mathbf{k}' , либо оба перпендикулярны ей. В первом случае вероятность перехода пропорциональна $\cos^2 \vartheta$, во втором случае она от угла рассеяния не зависит. Если вначале свет не поляризован, то необходимо вероятность перехода усреднить по поляризации λ и просуммировать по конечной поляризации λ' . Таким образом, получаем

$$\sum_{\lambda'} \overline{(\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{u}_{k'}^{(\lambda')})^2} = \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \vartheta). \quad (218.14)$$

Ниже будем предполагать, что в начальном состоянии электрон покоился. Это означает, что

$$\mathbf{q} = 0, \quad (218.15)$$

тогда с учетом формулы (218.12) закон сохранения энергии можно записать в виде

$$\hbar c \left[k' + \frac{1}{2\kappa} (\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2 \right] = \hbar c k. \quad (218.16)$$

Так как

$$(\mathbf{k}' - \mathbf{k})^2 = k'^2 + k^2 - 2kk' \cos \vartheta,$$

то предыдущее равенство представляет собой квадратное уравнение относительно k' . Его решение имеет вид

$$k' = k \cos \vartheta - \kappa + \sqrt{\kappa^2 + 2\kappa k (1 - \cos \vartheta) - k^2 \sin^2 \vartheta}. \quad (218.17)$$

Поскольку, далее, в силу (218.16)

$$\frac{dE_f}{dk'} = \hbar c \left[1 + \frac{1}{\kappa} (k' - k \cos \vartheta) \right],$$

то выражение (218.11) для плотности конечных состояний ρ_f можно представить в виде

$$\rho_f = \frac{\mathcal{V}^2}{8\pi^3 \hbar c} \frac{k'^2}{1 + \frac{1}{\kappa} (k' - k \cos \vartheta)} d\Omega'. \quad (218.18)$$

Таким образом, с учетом выражений (218.9), (218.10), (218.14) и (218.18) окончательно получаем

$$d\sigma = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{k'^2}{1 + \frac{1}{\kappa} (k' - k \cos \vartheta)} \cdot \frac{\frac{1}{2} (1 + \cos^2 \vartheta)}{kk'} d\Omega', \quad (218.19)$$

где величина k' определяется соотношением (218.17).

До сих пор все наши формулы в рамках нерелятивистской теории были совершенно точными, но, разумеется, ими следует пользоваться только в том случае, если кинетическая энергия электронов мала по сравнению с mc^2 :

$$E_{\text{кин}} = \hbar c (k - k') \ll mc^2 \quad \text{или} \quad k - k' \ll \kappa,$$

поэтому в формулах (218.17) и (218.19) целесообразно прибегнуть к разложению в ряд по степеням отношения k/κ . Имеем

$$\frac{k'}{\kappa} = \frac{k}{\kappa} - \frac{k^2}{\kappa^2} (1 - \cos \vartheta) + \dots$$

и

$$d\sigma = \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \left[1 - 2 \frac{k}{\kappa} (1 - \cos \vartheta) \right] (1 + \cos^2 \vartheta) d\Omega'. \quad (218.20)$$

Отсюда после элементарного интегрирования по угловым переменным получаем выражение для полного сечения рассеяния:

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{1}{1 + 2 \frac{k}{\kappa}}. \quad (218.21)$$

Как хорошо известно из классической электродинамики, в длинноволновом приближении сечение рассматриваемого процесса описывается формулой Томсона:

$$\sigma_0 = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 = 6,652 \times 10^{-25} \text{ см}^2. \quad (218.22)$$

Фигурирующий в выражении (218.21) дополнительный множитель представляет собой первую квантовую поправку, благодаря кото-

рой величина сечения уменьшается с ростом энергии фотона ($k/\kappa = \hbar\omega/mc^2$). Разумеется, мы можем ограничиться только этой поправкой лишь в том случае, если $k/\kappa \ll 1$, т. е. если длина волны падающего света велика по сравнению с комптоновской длиной волны $1/\kappa = \hbar/mc$ (при $\hbar\omega = mc^2 = 0,51$ МэВ или $k = \kappa$ мы имеем $\lambda = 2\pi\hbar/mc$).

Замечание 1. Если $q = 0$, то вклад от члена W' энергии взаимодействия (218.2) во втором порядке теории возмущений равен нулю. При релятивистском рассмотрении интересующего нас процесса обычно для плотности тока используется выражение (199.1), так что комптоновские переходы оказываются возможными лишь во втором порядке теории возмущений. Однако и в релятивистском случае решению можно придать форму, полностью аналогичную приведенной выше, если разбить выражение для плотности тока на две части, как это было сделано в задаче 199.

Замечание 2. Если энергия фотонов велика, то для описания электронов необходимо пользоваться уравнением Дирака. При этом вместо формулы (218.21) получается формула Клейна—Нишины. Следует, однако, заметить, что наше приближение оказывается хорошим в довольно широкой области энергий. Так, например, при $k/\kappa = 0,2$ из (218.21) получаем $\sigma/\sigma_0 = 0,714$, а точная формула Клейна—Нишины дает 0,737. Далее при $k/\kappa = 1$ соответственно имеем 0,333 и 0,431. Фактическая величина сечения рассеяния уменьшается с ростом энергии значительно медленнее, чем это следует из нашей приближенной формулы. Так, например, при $k/\kappa = 1000$ вместо точного значения 0,0215 получаем значение $\sigma/\sigma_0 = 0,0050$.

Задача 219. Тормозное излучение

В рамках нерелятивистской теории столкновение электрона с тяжелым ядром, сопровождающееся рождением γ -кванта, можно рассматривать как процесс второго порядка, в котором ядро считается бесконечно тяжелым и описывается просто его электростатическим полем. Пользуясь указанным приближением, рассчитать спектр тормозного излучения.

Решение. На фиг. 76 показаны две простейшие диаграммы, соответствующие рассматриваемому процессу. В начальном состоянии имеются покоящееся ядро и электрон с импульсом $\hbar q$. В конечном состоянии мы опять имеем покоящееся ядро, электрон с некоторым меньшим импульсом $\hbar q'$ и фотон в состоянии с квантовыми числами k и λ . Так как масса ядра предполагается бесконечной, то в процессе столкновения меняется лишь его импульс, а энергия остается прежней ($M = \infty$, p — конечная величина, $p^2/2M = 0$, $v = 0$). Таким образом, начальное и конечное состояния всех остальных частиц удовлетворяют закону сохранения энергии, закон же сохранения импульса для них не имеет места.

Энергия возмущения состоит из двух членов,

$$H' = H_1 + H_2, \quad (219.1)$$

причем первое слагаемое

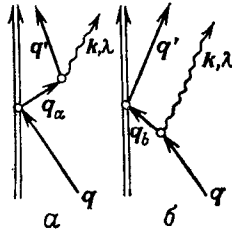
$$H_1 = -Ze^2 \int \frac{1}{r} \psi^\dagger \psi d^3x \quad (219.2)$$

описывает кулоновское взаимодействие ядра (заряд Ze) и электрона (плотность заряда $\rho = -e\psi^\dagger\psi$), а второе слагаемое

$$H_2 = \frac{1}{c} \int (\mathbf{A} \cdot \mathbf{j}) d^3x, \quad (219.3)$$

где

$$\mathbf{j} = -\frac{e\hbar}{2mi} (\psi^\dagger \nabla \psi - \nabla \psi^\dagger \cdot \psi),$$



Фиг. 76. Диаграммы Фейнмана низшего порядка для тормозного излучения. Двойные линии относятся к бесконечно тяжелому ядру, одиночные линии — к электронам, волнистые линии — к фотонам

представляет собой энергию взаимодействия электрона с полем излучения. Имеем

$$\mathbf{A} = \sum_{k, \lambda} \sqrt{\frac{2\pi c \hbar}{k \gamma^2}} \mathbf{u}_k^{(\lambda)} (b_{k\lambda} e^{ik \cdot r} + b_{k\lambda}^\dagger e^{-ik \cdot r}) \quad (219.4)$$

и

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\gamma^2}} \sum_{\nu} c_{\nu} e^{i q_{\nu} \cdot r}, \quad \nabla \psi = \frac{i}{\sqrt{\gamma^2}} \sum_{\nu} \mathbf{q}_{\nu} c_{\nu} e^{i q_{\nu} \cdot r}. \quad (219.5)$$

Подставляя выражения (219.4) и (219.5) в формулы (219.2) и (219.3), после интегрирования по всему пространству получаем

$$H_1 = -\frac{Ze^2}{\gamma^2} \sum_{\mu\nu} c_{\mu}^\dagger c_{\nu} \frac{4\pi}{|\mathbf{q}_{\mu} - \mathbf{q}_{\nu}|^2} \quad (219.6)$$

и

$$H_2 = -\frac{e\hbar}{2mc} \sum_{k, \lambda} \sum_{\mu, \nu} \sqrt{\frac{2\pi c \hbar}{k \gamma^2}} \mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot (\mathbf{q}_{\mu} + \mathbf{q}_{\nu}) \times \\ \times c_{\mu}^\dagger c_{\nu} (b_{k\lambda} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}_{\mu} - \mathbf{q}_{\nu}} + b_{k\lambda}^\dagger \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}_{\nu} - \mathbf{q}_{\mu}}). \quad (219.7)$$

Чтобы найти отличные от нуля матричные элементы, соответствующие процессу, изображенному на диаграмме фиг. 76, а, нужно

взять из H_1 члены, пропорциональные $c_{q_a}^\dagger c_{q'}$, и из H_2 члены, пропорциональные $c_{q_a} c_{q'}^\dagger b_{k\lambda}^\dagger$. Имеем

$$\langle q_a | H_1 | q \rangle = -\frac{4\pi Ze^2}{\mathcal{V}^2} \frac{1}{|\mathbf{q} - \mathbf{q}_a|^2} \quad (219.8a)$$

и

$$\langle q', k\lambda | H_2 | q_a \rangle = -\frac{e\hbar}{2mc} \sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{k\mathcal{V}^2}} \mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot (\mathbf{q}_a + \mathbf{q}'). \quad (219.8b)$$

Что касается первой вершины, то здесь у нас нет никакого закона сохранения, во второй же вершине должен выполняться закон сохранения импульса

$$\mathbf{k} + \mathbf{q}' = \mathbf{q}_a. \quad (219.9a)$$

Отсюда с учетом ортогональности векторов $\mathbf{u}_k^{(\lambda)}$ и \mathbf{k} получаем

$$\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot (\mathbf{q}_a + \mathbf{q}') = 2 (\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{q}'). \quad (219.10a)$$

В случае процесса, изображенного на диаграмме фиг. 76,б, мы должны взять из H_2 члены, пропорциональные $c_{q'} c_{q_b}^\dagger b_{k\lambda}^\dagger$, и из H_1 — члены, пропорциональные $c_{q_b} c_{q'}^\dagger$,

$$\langle q_b, k\lambda | H_2 | q \rangle = -\frac{e\hbar}{2mc} \sqrt{\frac{2\pi c\hbar}{k\mathcal{V}^2}} \mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_b) \quad (219.11a)$$

и

$$\langle q' | H_1 | q_b \rangle = -\frac{4\pi Ze^2}{\mathcal{V}^2} \cdot \frac{1}{|\mathbf{q}' - \mathbf{q}_b|^2}. \quad (219.11b)$$

В этом случае закон сохранения импульса имеет место в первой вершине

$$\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{q}_b = 0 \quad (219.9b)$$

и, следовательно,

$$\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{q}_b) = 2 (\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{q}). \quad (219.10b)$$

Энергия начального состояния

$$E_i = \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \quad (219.12)$$

должна равняться энергии конечного состояния

$$E_f = \frac{\hbar^2 q'^2}{2m} + \hbar c k, \quad (219.13)$$

поэтому

$$q^2 = q'^2 + 2\kappa k, \quad \kappa = \frac{mc}{\hbar}. \quad (219.14)$$

Для промежуточных состояний, согласно (219.9a) и (219.9б), имеем

$$E_a = \frac{\hbar^2 q_a^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{q}' + \mathbf{k})^2 \quad (219.15)$$

и

$$E_b = \frac{\hbar^2 q_b^2}{2m} + \hbar c k = \frac{\hbar^2}{2m} [(\mathbf{q} - \mathbf{k})^2 + 2\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}]. \quad (219.16)$$

Пользуясь введенными обозначениями, матричный элемент второго порядка можно записать в виде

$$\langle f | H' | i \rangle = \frac{\langle f | H_2 | a \rangle \langle a | H_1 | i \rangle}{E_i - E_a} + \frac{\langle f | H_1 | b \rangle \langle b | H_2 | i \rangle}{E_i - E_b}.$$

Подставляя сюда выражения для матричных элементов (219.8a), (219.8б) и (219.11a), (219.11б), а также выражения для импульсов \mathbf{q}_a и \mathbf{q}_b , находим

$$\langle f | H' | i \rangle = \frac{4\pi Z e^2}{\gamma^2} \cdot \frac{e\hbar}{mc} \sqrt{\frac{2\pi c \hbar}{k \gamma^2}} \cdot \frac{1}{|\mathbf{q} - \mathbf{q}' - \mathbf{k}|^2} \left[\frac{(\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{q}')}{E_i - E_a} + \frac{(\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{q})}{E_i - E_b} \right]. \quad (219.17)$$

Для получения сечения тормозного излучения необходимо воспользоваться золотым правилом и, следовательно, прежде всего вычислить плотность конечных состояний ρ_f . Здесь имеется небольшая трудность, так как из-за отсутствия закона сохранения импульса направления, в которых вылетают конечные частицы, являются независимыми. Для одной частицы (относящиеся к ней величины мы снабдим индексом 1), как мы знаем, имеет место формула

$$\rho_1 = \frac{d^3 p_1 \mathcal{V}^2}{h^3 dE_1} = \frac{p_1^2}{v_1} \frac{\mathcal{V}^2}{h^3} d\Omega_1.$$

Для другой частицы (относящиеся к ней величины мы снабдим индексом 2) плотность состояний ρ_2 определяется аналогичной формулой, но ширина интервала dE_2 и его положение на оси энергий в силу закона сохранения энергии зависят от ширины и положения интервала dE_1 для первой частицы. Таким образом, необходимо положить

$$\rho_f = \rho_1 \rho_2 dE_2.$$

Если считать, что индекс 1 относится к электрону (\mathbf{q}'), а индекс 2 — к фотону (\mathbf{k}), то в нашем частном случае имеем

$$\frac{p_1^2}{v_1} = m \hbar q', \quad \frac{p_2^2}{v_2} = \frac{1}{c} \hbar^2 k^2, \quad dE_2 = \hbar c dk$$

и

$$\rho_f = \frac{m\hbar q'}{8\pi^3\hbar^3} \mathcal{V} d\Omega' \cdot \frac{\hbar^2 k^2}{8\pi^3\hbar^3 c} \mathcal{V} d\Omega_k \cdot \hbar c dk. \quad (219.18)$$

Из общей формулы для дифференциального сечения,

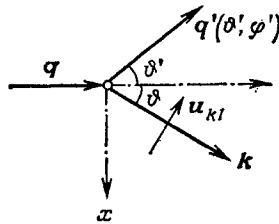
$$d\sigma = \frac{\mathcal{V}^2}{v_1} \cdot \frac{2\pi}{\hbar} \rho_f |\langle f | H' | i \rangle|^2,$$

после подстановки в нее выражений (219.17) и (219.18) получаем

$$d\sigma = \frac{e^2}{\hbar c} \cdot \frac{Z^2 e^4}{\pi^2} \cdot \frac{q' k}{q} \cdot \frac{1}{|q - q' - k|^4} \times \\ \times \left(\frac{(\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{q}')}{E_i - E_a} + \frac{(\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{q})}{E_i - E_b} \right)^2 d\Omega_k d\Omega' dk. \quad (219.19)$$

Здесь $d\Omega'$ — элемент телесного угла в направлении вылета электрона, $d\Omega_k$ — элемент телесного угла в направлении вылета фотона, а $c\hbar k$ и λ — его энергия и поляризация соответственно.

Нам осталось получить формулу для энергетического спектра тормозных фотонов безотносительно к его поляризации и направлениям вылета обеих частиц. Это означает, что последнее выра-



Фиг. 77. Тормозное излучение.
Показаны направления осей выбранной системы координат.

жение, мы должны просуммировать по λ и проинтегрировать по всем угловым переменным. В задачах рассматриваемого типа процедура интегрирования по угловым переменным довольно утомительна, однако в настоящем случае, как мы убедимся ниже, все обстоит очень просто.

На фиг. 77 показана система координат, в которой удобнее всего рассматривать три интересующих нас вектора импульса. Эти векторы некопланарны, т. е. если векторы \mathbf{q} и \mathbf{k} в выбранной системе координат располагаются в плоскости xz , то вектор \mathbf{q}' имеет составляющую вдоль оси y . Имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{q} &= q(0, 0, 1), \\ \mathbf{k} &= k(\sin \vartheta, 0, \cos \vartheta), \\ \mathbf{q}' &= q'(\sin \vartheta' \cos \varphi', \sin \vartheta' \sin \varphi', \cos \vartheta') \end{aligned}$$

и

$$\mathbf{u}_k^{(1)} = (-\cos \vartheta, 0, \cos \vartheta), \quad \mathbf{u}_k^{(2)} = (0, 1, 0).$$

Из формулы (219.14) следует, что $k \ll q$ и $k \ll q'$, поскольку величина κ велика, поэтому в нижеследующих расчетах мы воспользуемся типичным для нерелятивистской теории приближением и пренебрежем импульсом фотона по сравнению с импульсом электрона. Это позволяет упростить энергетические знаменатели, фигурирующие в формуле (219.19). Пользуясь соотношениями (219.12), (219.15) и (219.16), получаем

$$E_i - E_a = \frac{\hbar^2}{2m} (q^2 - q'^2 - 2(\mathbf{q}' \cdot \mathbf{k}) - k^2),$$

$$E_i - E_b = \frac{\hbar^2}{2m} (-2\kappa k + 2(\mathbf{q} \cdot \mathbf{k}) - k^2).$$

В обоих этих выражениях можно пренебречь двумя последними членами, а величину $2\kappa k$ заменить, согласно (219.14), разностью $q^2 - q'^2$. Таким образом, имеем

$$E_i - E_a \approx \frac{\hbar^2}{2m} (q^2 - q'^2) \approx -(E_i - E_b). \quad (219.20)$$

Следовательно, энергетические знаменатели в формуле (219.19) в этом приближении оказываются равными по величине и противоположными по знаку, так что мы можем просто вычесть один числитель из другого, полагая либо $\lambda = 1$, либо $\lambda = 2$:

$$(\mathbf{u}_k^{(1)} \cdot \mathbf{q}') - (\mathbf{u}_k^{(1)} \cdot \mathbf{q}) = q'(-\cos \vartheta \sin \vartheta' \cos \varphi' + \sin \vartheta \cos \vartheta') - q \sin \vartheta, \quad (219.21)$$

$$(\mathbf{u}_k^{(2)} \cdot \mathbf{q}') - (\mathbf{u}_k^{(2)} \cdot \mathbf{q}) = q' \sin \vartheta' \sin \varphi'.$$

Чтобы произвести суммирование по λ , необходимо возвести эти выражения в квадрат и сложить.

Наконец, резерфордовский знаменатель в формуле (219.19) в том же приближении можно записать в виде

$$(\mathbf{q} - \mathbf{q}' - \mathbf{k})^2 \approx (\mathbf{q} - \mathbf{q}')^2 = (q^2 + q'^2 - 2qq' \cos \vartheta')^2. \quad (219.22)$$

Собирая рассмотренные множители вместе, легко заметить, что углы ϑ и φ' фигурируют только в сумме, содержащей квадраты выражений (219.21). Интеграл по указанному угловым переменным вычисляется элементарно, и мы находим

$$\oint d\Omega_k \int_0^{2\pi} d\varphi' \sum_{\lambda} [(\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{q}') - (\mathbf{u}_k^{(\lambda)} \cdot \mathbf{q})]^2 = \frac{16\pi^2}{3} (q^2 + q'^2 - 2qq' \cos \vartheta'). \quad (219.23)$$

Согласно (219.22), точно такое же выражение, но только возведенное в квадрат, имеется у нас и в знаменателе, поэтому

$$d\sigma(k) = Z^2 \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \frac{16}{3} \frac{q'}{q} \frac{dk}{k} \int_{-1}^{+1} \frac{d(\cos \theta')}{q^2 + q'^2 - 2qq' \cos \theta'},$$

где через $d\sigma(k)$ обозначено сечение тормозного излучения фотонов с энергиями в интервале dk безотносительно к направлению их вылета и поляризации и безотносительно к направлению вылета электронов. Последний интеграл вычисляется элементарно,

$$\int_{-1}^{+1} \frac{dx}{q^2 + q'^2 - 2qq'x} = \frac{1}{q'q} \ln \frac{q+q'}{q-q'},$$

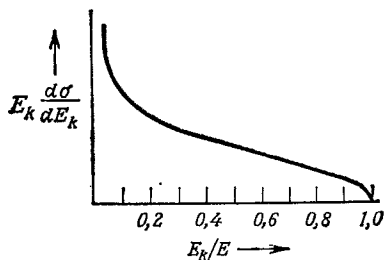
так что окончательно имеем

$$d\sigma(k) = \frac{16}{3} Z^2 \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \left(\frac{1}{q^2} \ln \frac{q+q'}{q-q'} \right) \frac{dk}{k}. \quad (219.24)$$

Из этой формулы с помощью соотношения (219.14) можно исключить импульсы, выразив величину q' через энергию E падающего электрона и энергию $E_k = \hbar ck$ тормозного фотона:

$$\ln \frac{q+q'}{q-q'} = \ln \frac{(q+q')^2}{q^2 - q'^2} = \ln \left[\frac{(\sqrt{E} + \sqrt{E-E_k})^2}{E_k} \right].$$

Описываемый полученной формулой энергетический спектр тормозных фотонов показан на фиг. 78. Мы видим, что в области очень



Фиг. 78. Распределение интенсивности тормозного излучения.

Учет экранировки кулоновского поля устраняет логарифмическую расходимость при $E_k=0$.

малых энергий фотона имеется сингулярность, которую обычно называют инфракрасной расходимостью.

Замечание. Последовательное релятивистское решение задачи, а также вопросы, связанные с экранировкой, см. в книге Гайтлера: *Heitler W.*, Quantum Theory of Radiation, 3rd ed., Oxford, 1954, pp. 242—256. (Имеется перевод: *Гайтлер В.*, Квантовая теория излучения, ИЛ, 1956, стр. 275—290.— *Прим. перев.*)

Математическое приложение

Криволинейные координаты

Ниже приводятся формулы, связывающие прямоугольные декартовы координаты x, y, z с наиболее часто встречающимися криволинейными координатами, а также выражения для расстояния между точкой и началом координат

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

и для оператора Лапласа

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

а. Сферические координаты. Если полярная ось сферической системы координат совпадает с осью z , и угол между радиус-вектором \mathbf{r} и этой осью обозначен через ϑ , а азимутальный угол — через φ , то (см. фиг. 33 стр. 154, том 1)

$$\begin{aligned} x &= r \sin \vartheta \cos \varphi, & y &= r \sin \vartheta \sin \varphi, & z &= r \cos \vartheta, \\ \nabla^2 u &= \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial u}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} \right\}. \end{aligned}$$

б. Цилиндрические координаты. Пусть ось z является общей осью коаксиальных цилиндрических поверхностей $\rho = \text{const}$, а φ — снова азимутальный угол, и пусть координаты точки характеризуются тройкой чисел ρ, φ, z , тогда

$$\begin{aligned} x &= \rho \cos \varphi, & y &= \rho \sin \varphi, & z &= z, & r &= \sqrt{\rho^2 + z^2}, \\ \nabla^2 u &= \frac{\partial^2 u}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}. \end{aligned}$$

в. Параболические координаты. Пусть ось z является общей осью двух систем параболоидов вращения $\xi = \text{const}$ и $\eta = \text{const}$, фокусы которых расположены в начале координат ($z = 0$), а раструбы направлены соответственно в положительную и отрицательную стороны оси z . Азимутальный угол радиус-вектора \mathbf{r} снова обозначим через φ . Чаще всего используются две следующие системы координат ξ, η, φ .

Первая система

$$x = \sqrt{\xi\eta} \cos \varphi, \quad y = \sqrt{\xi\eta} \sin \varphi, \quad z = \frac{1}{2} (\xi - \eta);$$

$$r = \frac{1}{2} (\xi + \eta), \quad \xi = r + z, \quad \eta = r - z, \quad \rho = \sqrt{\xi\eta};$$

$$\nabla^2 u = \frac{4}{\xi + \eta} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) + \frac{\xi + \eta}{4\xi\eta} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} \right\}.$$

Вторая система

$$x = \xi\eta \cos \varphi, \quad y = \xi\eta \sin \varphi, \quad z = \frac{1}{2} (\xi^2 - \eta^2);$$

$$r = \frac{1}{2} (\xi^2 + \eta^2), \quad \xi^2 = r + z, \quad \eta^2 = r - z, \quad \rho = \xi\eta;$$

$$\nabla^2 u = \frac{1}{\xi^2 + \eta^2} \left\{ \frac{1}{\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) + \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) + \left(\frac{1}{\xi^2} + \frac{1}{\eta^2} \right) \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} \right\}.$$

г. Эллипсоидальные координаты. Две точки, лежащие на оси z ($z = \pm c$), выбираются в качестве общих фокусов вытянутых эллипсоидов вращения, которые описываются уравнением $\xi = \text{const}$. Пусть далее уравнение $\eta = \text{const}$ описывает систему двуполостных гиперболоидов вращения, фокусы которых расположены в тех же точках. Как известно, эти две системы поверхностей ортогональны между собой. Обозначим через φ азимутальный угол радиус-вектора \mathbf{r} , а через r_1 и r_2 — расстояния от точки соответственно до фокусов $z = -c$ и $z = +c$, тогда

$$x = c\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \cos \varphi, \quad y = c\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \sin \varphi,$$

$$z = c\xi\eta, \quad r_1 = c(\xi + \eta), \quad r_2 = c(\xi - \eta),$$

$$\xi = \frac{1}{2c}(r_1 + r_2), \quad \eta = \frac{1}{2c}(r_1 - r_2),$$

$$r = c\sqrt{\xi^2 + \eta^2 - 1}, \quad \rho = c\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}.$$

Область изменения переменных:

$$1 \leq \xi < \infty, \quad -1 \leq \eta \leq +1, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi.$$

$$\nabla^2 u = \frac{1}{c^2(\xi^2 - \eta^2)} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial u}{\partial \eta} + \frac{\xi^2 - \eta^2}{(1 - \eta^2)(\xi^2 - 1)} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} \right\}.$$

Г-функция

Г-функция представляет собой обобщение функции

$$n! = 1 \cdot 2 \cdot 3 \dots n. \quad (1)$$

Эта функция определена лишь для целых положительных чисел и удовлетворяет равенству

$$(n + 1)! = (n + 1)n! \quad (2)$$

Функцию $n!$ можно также определить с помощью *интеграла Эйлера*

$$n! = \int_0^{\infty} e^{-t} t^n dt, \quad (3)$$

если условиться, что $0! = 1$.

Г-функция позволяет обобщить соотношения (2) и (3) на случай произвольного комплексного числа $z = x + iy$:

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z), \quad \Gamma(n+1) = n! \quad (4)$$

и

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} e^{-t} t^{z-1} dt, \quad (5)$$

если $\operatorname{Re} z > 0$. Определенная выше функция является мероморфной и имеет полюсы на отрицательной действительной полуоси. Эти полюсы расположены в точках $z = -n$ ($n = 0, 1, 2, \dots$), а вычеты в них равны $(-1)^n/n!$.

Частные значения.

$$\Gamma(1) = 0! = 1, \quad \Gamma(n) = (n-1)!, \quad (6)$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}, \quad \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \left(\frac{1}{2}\right)! = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}, \quad (7)$$

$$\Gamma\left(n + \frac{3}{2}\right) = \left(n + \frac{1}{2}\right)! = \frac{(2n+1)!}{2^{2n+1}n!} \sqrt{\pi}. \quad (8)$$

Соотношения между Г-функциями от различных аргументов.

$$\Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin \pi z}, \quad (9)$$

$$\Gamma(2z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} 2^{2z-1} \Gamma(z)\Gamma\left(z + \frac{1}{2}\right). \quad (10)$$

Разложения в виде бесконечных рядов или произведений. Для вычисления комплексного числа

$$\Gamma(x+iy) = \xi e^{t\eta} \quad (11a)$$

можно пользоваться разложениями

$$\xi = \Gamma(x) \prod_{n=0}^{\infty} \left[1 + \frac{y^2}{(x+n)^2} \right]^{-1/2}, \quad (11б)$$

и

$$\eta = y \left[-C + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{y} \operatorname{arctg} \frac{y}{x+n-1} \right) \right], \quad (11в)$$

где

$$C = \int_0^{\infty} e^{-t} \ln \frac{1}{t} dt = 0,577215 \dots, \quad (11\Gamma)$$

— так называемая постоянная Эйлера. В частном случае, когда $x = 1$, имеем

$$\xi^2 = |\Gamma(1 + iy)|^2 = \frac{\pi y}{\operatorname{sh} \pi y}. \quad (12)$$

Асимптотическое поведение. При $|z| \gg 1$ и $|\arg z| < \pi$ (тем самым исключаются точки z , лежащие на действительной отрицательной полуоси, где расположены полюсы Γ -функции) можно воспользоваться *формулой Стирлинга*:

$$\ln \Gamma(z) = \left(z - \frac{1}{2}\right) \ln z - z + \frac{1}{2} \ln 2\pi + O\left(\frac{1}{z}\right), \quad (13)$$

или

$$\Gamma(z) \approx \sqrt{\frac{2\pi}{z}} e^z (\ln z - 1). \quad (14)$$

Для точных вычислений часто используется формула

$$z! = \Gamma(z + 1) = z\Gamma(z) \approx \sqrt{2\pi z} e^z (\ln z - 1) \left(1 + \frac{1}{12z} + \frac{1}{288z^2} + \dots\right). \quad (15)$$

Фигурирующий здесь ряд является асимптотическим. О точности этой формулы позволяет судить приводимая ниже таблица (при расчетах ряд в скобках был заменен 1).

n	$n!$	$\sqrt{2\pi n} e^{n(\ln n - 1)}$
0	1	0,
1	1	0,925
2	2	1,920
3	6	5,836
4	24	23,506
5	120	118,01

Функции Бесселя

Решение дифференциального уравнения

$$u'' + \frac{1}{z} u' + \left(1 - \frac{\nu^2}{z^2}\right) u = 0 \quad (1)$$

можно записать либо в виде

$$u = AJ_\nu(z) + BN_\nu(z), \quad (2)$$

либо в виде

$$u = C_1 H_\nu^{(1)}(z) + C_2 H_\nu^{(2)}(z). \quad (3)$$

Функция J_ν называется *функцией Бесселя*, а функция N_ν — *функцией Неймана*. Если ν не является целым числом, то можно пользоваться определением

$$N_\nu(z) = \frac{1}{\sin \pi \nu} \left(\cos \pi \nu J_\nu(z) - J_{-\nu}(z) \right). \quad (4)$$

В противном случае (т. е. при $\nu = n$, где $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$) функции J_n и J_{-n} не являются линейно независимыми и связаны соотношением

$$J_{-n}(z) = (-1)^n J_n(z). \quad (5)$$

Функцию $N_n(z)$ можно определить и в этом случае, исходя из ее асимптотического поведения (см. ниже).

Функцию Бесселя J_ν можно также определить посредством ряда

$$J_\nu(z) = \left(\frac{z}{2}\right)^\nu \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! \Gamma(\nu + n + 1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{2n}, \quad (6)$$

который сходится на всей комплексной плоскости z с разрезом вдоль действительной отрицательной полуоси (точка $z = 0$ является в общем случае точкой ветвления).

Функции $H_\nu^{(1)}$ и $H_\nu^{(2)}$ называются *функциями Ханкеля* соответственно первого и второго рода. Эти функции определяются соотношениями

$$H_\nu^{(1)}(z) = J_\nu(z) + iN_\nu(z), \quad H_\nu^{(2)}(z) = J_\nu(z) - iN_\nu(z). \quad (7)$$

Функции, образующие фундаментальную систему решений (2), принимают действительные значения при действительных значениях z , а их вронскиан равен $2/(\pi z)$. Вронскиан фундаментальной системы решений (3) равен $-4i/(\pi z)$. Если ν не есть целое число, то функции J_ν и $J_{-\nu}$ образуют третью фундаментальную систему решений с вронскианом, равным $-2 \sin \pi \nu / (\pi z)$.

Рекуррентные соотношения. Для каждого из четырех типов функций, определенных равенствами (2) и (3), имеют место рекуррентные соотношения:

$$u_{\nu-1} + u_{\nu+1} = \frac{2\nu}{z} u_\nu, \quad u_{\nu-1} - u_{\nu+1} = 2u'_\nu, \quad (8a)$$

или

$$u_{\nu+1} = \frac{\nu}{z} u_{\nu} - u'_{\nu}, \quad u_{\nu+1} = \frac{2\nu}{z} u_{\nu} - u_{\nu-1}. \quad (86)$$

Асимптотическое поведение. Для дальнейшего удобно ввести обозначение

$$\xi = z - \frac{\pi}{2} \left(\nu + \frac{1}{2} \right). \quad (9a)$$

Если $|z| \gg 1 + |\nu|$ и $|\arg z| < \pi$ (т. е. для больших значений $|z|$ в комплексной плоскости z с разрезом вдоль действительной отрицательной полуоси), то можно пользоваться асимптотическими формулами

$$\begin{aligned} J_{\nu}(z) &\rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos \xi, & N_{\nu}(z) &\rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin \xi; \\ H_{\nu}^{(1)}(z) &\rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{i\xi}, & H_{\nu}^{(2)}(z) &\rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{-i\xi}. \end{aligned} \quad (96)$$

Функции вида $z^{-1/2} H_{\nu}^{(1, 2)}(z)$ при действительных положительных z описывают соответственно расходящиеся и сходящиеся волны.

Модифицированные функции Бесселя. Функции

$$I_{\nu}(x) = i^{-\nu} J_{\nu}(ix) \quad (10)$$

и

$$K_{\nu}(x) = \frac{i\pi}{2} i^{\nu} H_{\nu}^{(1)}(ix) \quad (11a)$$

или (если ν не равно целому числу)

$$K_{\nu}(x) = \frac{\pi}{2 \sin \nu\pi} [I_{-\nu}(x) - I_{\nu}(x)] \quad (116)$$

принимают действительные значения, когда x действительная и положительная величина. Функция K_{ν} представляет особый интерес благодаря ее асимптотическому поведению при больших значениях x :

$$K_{\nu}(x) \rightarrow \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x}. \quad (12)$$

Большое число формул для функций K_0 и K_1 имеется в задаче 185. В задаче 99 было показано, что решением дифференциального уравнения

$$u'' - g^2 x - nu = 0 \quad (13a)$$

является функция

$$u = \sqrt{x} K_{\frac{1}{2\lambda}} \left(\frac{g}{\lambda} x^{-\lambda} \right), \quad (136)$$

где

$$\lambda = \frac{n-2}{2}.$$

В некоторых дифракционных задачах оптики большую роль играет функция Эйри

$$\text{Ai}(x) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{x}{3}} K_{1/3} \left(\frac{2}{3} x^{3/2} \right). \bullet \quad (14a)$$

Аналитическое продолжение в область отрицательных значений x приводит к соотношению

$$\text{Ai}(-x) = \frac{1}{3} \sqrt{x} \left[J_{1/3} \left(\frac{2}{3} x^{3/2} \right) + J_{-1/3} \left(\frac{2}{3} x^{3/2} \right) \right]. \quad (14б)$$

В этой книге функция Эйри использовалась в задаче 40, там же на фиг. 28 приведен ее график. Функцию Эйри можно было бы использовать и в задаче 117, но мы предпочли вернуться непосредственно к функциям Бесселя J_ν и I_ν с $\nu = \pm 1/3$.

Сферические функции Бесселя. Функция Бесселя с индексом $\nu = l + 1/2$, где $l = 0, 1, 2, \dots$, играют в физике большую роль, так как они появляются при решении волнового уравнения методом разделения переменных в сферических координатах. Обычно вводят функции четырех стандартных типов ¹⁾:

$$j_l(z) = \sqrt{\frac{\pi z}{2}} J_{l+1/2}(z), \quad (15)$$

$$n_l(z) = \sqrt{\frac{\pi z}{2}} N_{l+1/2}(z) = (-1)^{l+1} \sqrt{\frac{\pi z}{2}} J_{-(l+1/2)}(z), \quad (16)$$

$$h_l^{(1)}(z) = j_l(z) + in_l(z), \quad h_l^{(2)}(z) = j_l(z) - in_l(z). \quad (17)$$

Эти функции являются решениями дифференциального уравнения

$$u'' + \left(1 - \frac{\left(l + \frac{1}{2} \right)^2}{z^2} \right) u = 0 \quad (18)$$

¹⁾ В литературе наши функции j_l и т. д. часто обозначают через \hat{j}_l и т. д., и, кроме того, вводят функции

$$i_l = \frac{1}{z} \hat{i}_l.$$

Преимущество такой системы обозначений состоит в том, что теперь функции

$$h_l^{(1, 2)}(z) = \frac{1}{z} \hat{h}_l^{(1, 2)}(z)$$

имеют смысл расходящихся и сходящихся сферических волн.

и обладают очень простым асимптотическим поведением:

$$\begin{aligned} j_l(z) &\rightarrow \sin\left(z - \frac{l\pi}{2}\right), & n_l(z) &\rightarrow -\cos\left(z - \frac{l\pi}{2}\right), \\ h_l^{(1)} &\rightarrow i^{-(l+1)}e^{iz}, & h_l^{(2)}(z) &\rightarrow i^{l+1}e^{-iz}. \end{aligned} \quad (19)$$

Для справок приведем значения наиболее часто встречающихся вронскианов:

$$j_l n_l' - n_l j_l' = 1, \quad h_l^{(1)} h_l^{(2)'} - h_l^{(2)} h_l^{(1)'} = -2i. \quad (20)$$

При $|z| \ll l + 1/2$ имеют место приближенные формулы

$$j_l(z) \approx \frac{2^l l!}{(2l+1)!} z^{l+1}, \quad n_l(z) = -\frac{(2l)!}{2^l l!} z^{-l}. \quad (21)$$

Рекуррентные соотношения. Для каждого из четырех типов функций, определенных равенствами (15)–(17), справедливы соотношения

$$u_{l+1} = \frac{2l+1}{z} u_l - u_{l-1}, \quad u_{l+1} = \frac{l+1}{z} u_l - u_l'. \quad (22)$$

Первое из указанных соотношений можно также использовать для определения сферических функций Бесселя при отрицательных значениях l .

Сферические функции Бесселя являются элементарными функциями. Несколько первых функций приводятся ниже:

$$\begin{aligned} j_0 &= \sin z, & n_0 &= -\cos z, \\ j_1 &= \frac{\sin z}{z} - \cos z, & n_1 &= -\frac{\cos z}{z} - \sin z, \\ j_2 &= \left(\frac{3}{z^2} - 1\right) \sin z - \frac{3}{z} \cos z, & n_2 &= -\left(\frac{3}{z^2} - 1\right) \cos z - \frac{3}{z} \sin z \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} h_0^{(1)} &= -ie^{iz}, & h_0^{(2)} &= ie^{-iz}, \\ h_1^{(1)} &= \left(-\frac{i}{z} - 1\right) e^{iz}, & h_1^{(2)} &= \left(\frac{i}{z} - 1\right) e^{-iz}, \\ h_2^{(1)} &= \left(-\frac{3i}{z^2} - \frac{3}{z} + i\right) e^{iz}, & h_2^{(2)} &= \left(\frac{3i}{z^2} - \frac{3}{z} - i\right) e^{-iz}, \end{aligned}$$

Функции Лежандра

Дифференциальное уравнение

$$(1-z^2)u'' - 2zu' + v(v+1)u = 0 \quad (1)$$

принадлежит к уравнениям гипергеометрического типа с тремя особыми точками: $z = \pm 1$ и $z = \infty$. Общее решение уравнения

(1) можно записать в виде

$$u_v = A_2 F_1 \left(-v, v+1, 1; \frac{1-z}{2} \right) + Bz^{-v-1} {}_2F_1 \left(\frac{v}{2} + 1, \frac{v}{2} + \frac{1}{2}, v + \frac{3}{2}; \frac{1}{z^2} \right), \quad (2)$$

где первое и второе слагаемые представляют собой, если отвлечься от нормировочных множителей, так называемые функции Лежандра первого и второго родов, которые обычно обозначают соответственно через $P_v(z)$ и $Q_v(z)$.

Если v — целое число ($v=l$; $l=0, 1, 2, \dots$), то функция Лежандра первого рода вырождается в полином. Когда $z=x$, где x — действительное число и $|x| \leq 1$ или $x = \cos \vartheta$, полиномы Лежандра, будучи связаны со сферическими гармониками $Y_{l,m}$ соотношением

$$P_l(\cos \vartheta) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} Y_{l,0}, \quad (3)$$

имеют простой геометрический смысл.

Свойства полиномов Лежандра. Эти полиномы образуют ортогональную систему:

$$\int_{-1}^{+1} P_l(x) P_{l'}(x) dx = \frac{1}{l+\frac{1}{2}} \delta_{ll'}. \quad (4)$$

Первые пять полиномов имеют вид

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}, \\ P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x, \quad P_4(x) = \frac{35}{8}x^4 - \frac{15}{4}x^2 + \frac{3}{8}. \quad (5)$$

Все они либо четные, либо нечетные функции переменной x . Четность полиномов Лежандра определяется четностью индекса l :

$$P_l(-x) = (-1)^l P_l(x). \quad (6)$$

Полиномы с $l \geq 2$ можно получить с помощью рекуррентного соотношения

$$(l+1)P_{l+1}(x) + lP_{l-1}(x) = (2l+1)xP_l(x). \quad (7)$$

Полиномы Лежандра и их производные связаны простым соотношением

$$(1-x^2)P'_l = l(P_{l-1} - xP_l) = (l+1)(xP_l - P_{l+1}), \quad (8a)$$

из которого, в частности, следует

$$(2l+1)P_l = P'_{l+1} - P'_{l-1}. \quad (8b)$$

При $x = \pm 1$ имеем

$$P_l(\pm 1) = (-1)^l \quad (9a)$$

и

$$\frac{d^n P_l(\pm 1)}{dx^n} = (\mp 1)^{l+n} \frac{(l+n)!}{2^n n! (l-n)!}. \quad (9б)$$

Если ввести новую переменную $x = \cos \vartheta$, то определение (2) полиномов Лежандра можно представить в иной форме:

$$\begin{aligned} P_l(\cos \vartheta) &= {}_2F_1\left(l+1, -l, 1; \sin^2 \frac{\vartheta}{2}\right) = \\ &= \sum_{n=0}^l (-1)^n \frac{(l+n)!}{(n!)^2 (l-n)!} \sin^{2n} \frac{\vartheta}{2} = \\ &= 1 - \frac{l(l+1)}{(1!)^2} \sin^2 \frac{\vartheta}{2} + \frac{(l-1)l(l+1)(l+2)}{(2!)^2} \sin^4 \frac{\vartheta}{2} \dots \end{aligned} \quad (10)$$

Когда $l \gg 1$, а модуль $|\sin \vartheta/2|$ по порядку величины равен $1/l$, последний ряд упрощается и мы получаем

$$P_l(\cos \vartheta) \approx J_0\left(2l+1 \sin \frac{\vartheta}{2}\right), \quad (11)$$

причем ошибка этого приближения имеет порядок $1/l^2$. Что же касается корней полиномов P_l , то и при больших значениях угла ϑ они довольно хорошо описываются приближенной формулой (11). Для случая $l=10$ полином Лежандра и соответствующая ему аппроксимирующая функция Бесселя показаны на фиг. 55 (том 1, стр. 284).

О соотношениях, связанных с геометрической интерпретацией, см. раздел, посвященный сферическим гармоникам.

Функции Лежандра первого рода. Когда ν не является целым числом, ряд (10) уже не обрывается на конечном члене, и $P_\nu(x)$ становится трансцендентной функцией с особенностями в точках $x = \pm 1$. Эту функцию можно разложить в ряд по полиномам Лежандра:

$$P_\nu(x) = \frac{\sin \pi \nu}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (2n+1)}{(v-n)(v+n+1)} P_n(x). \quad (12)$$

Ряд (12) — частный случай разложения функции

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) f_n P_n(x) \quad (13a)$$

с коэффициентами

$$f_n = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} f(x) P_n(x) dx. \quad (13б)$$

Так как полиномы Лежандра образуют *полную* ортогональную систему, то такое разложение возможно для широкого класса функций.

Приведем примеры часто используемых разложений:

$$e^{ixy} = \frac{1}{y} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(y) P_l(x) \text{ для } |x| < 1, \quad (14)$$

$$\frac{\sin(y \sqrt{2(1-x)})}{y \sqrt{2(1-x)}} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l^2(y) P_l(x). \quad (15)$$

В физических приложениях обычно $y = kr$ и $x = \cos \vartheta$, так что

$$y \sqrt{2(1-x)} = 2kr \sin \frac{\vartheta}{2}.$$

Ряды (14) и (15) сходятся при всех действительных значениях переменной y . Другой важный пример:

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xy+y^2}} = \sum_{n=0}^{\infty} y^n P_n(x) \text{ при } |y| < 1. \quad (16)$$

Последнее разложение можно также использовать в качестве определения полиномов Лежандра.

Функции Лежандра второго рода. Рассмотрим разложение

$$\frac{1}{z-x} = \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1) Q_n(z) P_n(x), \quad (16a)$$

где z — произвольное комплексное число, не принадлежащее отрезку действительной оси $[+1, -1]$. Функция $Q_n(z)$, определенная соотношением

$$Q_n(z) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \frac{P_n(x) dx}{z-x}, \quad (166)$$

называется функцией Лежандра второго рода. В силу симметрии разложения (16a) по отношению к переменным z и x эти функции должны удовлетворять тому же самому дифференциальному уравнению (1), которому удовлетворяют полиномы Лежандра $P_n(x)$. Функции Лежандра второго рода имеют при $z = \pm 1$ логарифмические точки ветвления. Приведем явные выражения для трех

первых функций Лежандра второго рода:

$$\begin{aligned} Q_0(z) &= \frac{1}{2} \ln \frac{z+1}{z-1}, \\ Q_1(z) &= P_1(z) Q_0(z) - 1, \\ Q_2(z) &= P_2(z) Q_0(z) - \frac{3}{2} z. \end{aligned} \quad (17)$$

Выражения для функций более высокого порядка можно получить с помощью рекуррентного соотношения (7), которое справедливо для функций $Q_n(z)$, так же как и для полиномов $P_n(z)$. В общем случае функция $Q_n(z)$ имеет вид

$$Q_n(z) = P_n(z) Q_0(z) - W_{n-1}(z), \quad (18)$$

где W_{n-1} — полином $(n-1)$ -й степени. Этот полином является четным, если четен индекс n , и нечетным в противном случае.

Сферические гармоники

Если при разделении переменных в волновом уравнении используются сферические координаты

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi, \quad y = r \sin \vartheta \sin \varphi, \quad z = r \cos \vartheta \quad (1)$$

(ось z выбрана в качестве полярной оси), то угловая часть решения должна удовлетворять дифференциальному уравнению

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial u}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2} + l(l+1)u = 0, \quad (2)$$

где $l = 0, 1, 2, \dots$. Производя дальнейшее разделение переменных

$$u = \Theta(\vartheta) e^{im\varphi}, \quad (3a)$$

где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, получаем

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right] \Theta = 0. \quad (3b)$$

Последнее уравнение с помощью замены переменной

$$t = \frac{z}{r} = \cos \vartheta$$

приводится к виду

$$(1-t^2) \frac{d^2 \Theta}{dt^2} - 2t \frac{d\Theta}{dt} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-t^2} \right] \Theta = 0. \quad (3в)$$

Уравнение (3в) является обобщением уравнения для полиномов Лежандра $P_l(t)$ и переходит в него при $m=0$. Однако при $m \neq 0$

это уравнение принадлежит к общим уравнениям гипергеометрического типа. Его единственное произвольно нормированное регулярное решение можно представить в форме

$$\Theta_{l,m} = (1-t^2)^{m/2} \frac{d^m P_l(t)}{dt^m}, \quad (3г)$$

где $m \geq 0$. Как оказывается, функции $\Theta_{l,-m}$ не являются новыми функциями и их можно выразить через функции $\Theta_{l,m}$. Так как полином P_l имеет отличные от нуля производные лишь в том случае, если их порядок не превышает l , то при данном значении l существует всего $2l+1$ регулярных решений, для которых $|m| \leq l$ (напомним, что здесь m — целое число).

Перейдем теперь к вопросу о нормировке. Мы будем придерживаться наиболее употребительного соглашения, которое лучше всего отражает геометрический смысл этих решений, всюду регулярных на поверхности единичной сферы:

$$Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathcal{P}_l^m(\vartheta) e^{im\varphi} \quad (4)$$

и

$$\oint |Y_{l,m}|^2 d\Omega = 1 \quad (5)$$

или

$$\int_0^\pi |\mathcal{P}_l^m(\vartheta)|^2 \sin \vartheta d\vartheta = 1. \quad (6)$$

Таким образом, для нормированных функций (3г) имеем

$$\mathcal{P}_l^m = \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} (1-t^2)^{m/2} \frac{d^m P_l(t)}{dt^m}. \quad (7)$$

Чтобы включить отрицательные значения m , по определению положим

$$\mathcal{P}_l^{-m}(\vartheta) = (-1)^m \mathcal{P}_l^m(\vartheta). \quad (8)$$

Явные выражения для сферических гармоник с $l=0, 1, 2, 3$ приведены в томе 1 на стр. 183, 184. При $m=0$ имеют место полезные соотношения

$$\mathcal{P}_l^0 = \sqrt{l + \frac{1}{2}} P_l \quad \text{и} \quad Y_{l,0} = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l. \quad (9)$$

Рекуррентные соотношения. Существует целый ряд важных соотношений, связывающих сферические гармоники с соседними

значениями индексов l и m :

$$\sin \vartheta e^{i\varphi} Y_{l, m} = a_{l, m} Y_{l+1, m+1} - a_{l-1, -m-1} Y_{l-1, m+1}, \quad (10a)$$

$$\sin \vartheta e^{-i\varphi} Y_{l, m} = -a_{l, -m} Y_{l+1, m-1} + a_{l-1, m-1} Y_{l-1, m-1}, \quad (10b)$$

$$\cos \vartheta Y_{l, m} = b_{l, m} Y_{l+1, m} + b_{l-1, m} Y_{l-1, m}, \quad (11)$$

где

$$a_{l, m} = \sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}, \quad (12)$$

$$b_{l, m} = \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}.$$

Повторное применение соотношений (10) и (11) позволяет преобразовывать выражения, содержащие произведения более высоких степеней $\sin \vartheta$ и $\cos \vartheta$ и функции $Y_{l, m}$; разумеется, при этом появляются сферические гармоники с индексами, отличающимися более чем на ± 1 от индексов l и m .

Производные. Действуя на сферическую гармонику операторами

$$r \left(\frac{\partial}{\partial x} \pm i \frac{\partial}{\partial y} \right) = e^{\pm i\varphi} \left\{ \sin \vartheta r \frac{\partial}{\partial r} + \cos \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \pm \frac{i}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\}$$

и

$$r \frac{\partial}{\partial z} = \cos \vartheta r \frac{\partial}{\partial r} - \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta}, \quad (13)$$

получаем

$$r \left(\frac{\partial}{\partial x} \pm i \frac{\partial}{\partial y} \right) Y_{l, m} = \mp l a_{l, \pm m} Y_{l+1, m+1} \mp (l+1) a_{l-1, \mp m-1} Y_{l-1, m \pm 1},$$

$$r \frac{\partial}{\partial z} Y_{l, m} = -b_{l, m} Y_{l+1, m} + (l+1) b_{l-1, m} Y_{l-1, m}, \quad (14)$$

где $a_{l, m}$ и $b_{l, m}$ определяются выражениями (12).

В теории момента количества движения большую роль играют эрмитовы операторы L_x , L_y , L_z , где

$$L_z = -i \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \text{ и т. д.} \quad (15)$$

В сферических координатах имеем

$$L_{\pm} = L_x \pm i L_y = i e^{\pm i\varphi} \left(\mp i \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (16a)$$

и

$$L_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (16b)$$

Действуя на сферическую гармонику, операторы L_+ и L_- соответственно повышают и понижают индекс m на 1:

$$L_+ Y_{l, m} = -\sqrt{l(l+1)-m(m+1)} Y_{l, m+1}, \quad (17a)$$

$$L_- Y_{l, m} = -\sqrt{l(l+1)-m(m-1)} Y_{l, m-1}. \quad (17b)$$

Что же касается оператора L_z , то для него $Y_{l, m}$ является собственной функцией, причём

$$L_z Y_{l, m} = m Y_{l, m}. \quad (18)$$

Сферические гармоники, кроме того, являются собственными функциями оператора

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = \frac{1}{2} (L_+ L_- + L_- L_+) + L_z^2 \quad (19)$$

и удовлетворяют уравнению

$$L^2 Y_{l, m} = l(l+1) Y_{l, m}. \quad (20)$$

Отметим также полезные соотношения

$$L_- L_+ Y_{l, m} = [l(l+1) - m(m+1)] Y_{l, m}, \quad (21a)$$

$$L_+ L_- Y_{l, m} = [l(l+1) - m(m-1)] Y_{l, m}. \quad (21b)$$

Введенные здесь операторы L_i отличаются от операторов проекций момента количества движения, использованных в этой книге, множителем \hbar .

Ортогональность и часто встречающиеся разложения. Для сферических гармоник выполняются условия ортонормированности

$$\oint Y_{l', m'}^* Y_{l, m} d\Omega = \delta_{l'l} \delta_{m'm}. \quad (22)$$

Так как, далее, сферические гармоники образуют полную систему, то любую регулярную на единичной сфере функцию $f(\vartheta, \varphi)$ можно представить в виде

$$f(\vartheta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} f_{l, m} Y_{l, m}(\vartheta, \varphi), \quad (23a)$$

где коэффициенты разложения $f_{l, m}$ определяются формулой

$$f_{l, m} = \oint Y_{l, m}^*(\vartheta, \varphi) f(\vartheta, \varphi) d\Omega. \quad (23b)$$

Ниже приводятся примеры часто встречающихся разложений.

1. *Разложения для полинома Лежандра $P_l(\cos \gamma)$* , где γ — угол между векторами, концы которых лежат на единичной сфере в точках с координатами ϑ, φ и ϑ', φ' :

$$P_l(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} Y_{l, m}^*(\vartheta', \varphi') Y_{l, m}(\vartheta, \varphi). \quad (24)$$

Эта формула известна как теорема сложения.

2. *Разложение плоской волны.* Если плоская волна распространяется вдоль полярной оси, то в разложении участвуют

лишь полиномы Лежандра:

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \vartheta} = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{4\pi(2l+1)} i^l j_l(kr) Y_{l,0}(\vartheta). \quad (25)$$

Доказательство этой формулы было дано в процессе решения задачи 81. Обращая формулу (25), получаем полезное интегральное представление сферических функций Бесселя:

$$j_l(z) = i^{-l} \frac{z}{2} \int_{-1}^{+1} e^{izt} P_l(t) dt. \quad (26)$$

Если плоская волна распространяется в направлении вектора \mathbf{k} со сферическими углами Θ и Φ , то имеет место разложение общего вида

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} = \frac{4\pi}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} i^l j_l(kr) Y_{l,m}^*(\Theta, \Phi) Y_{l,m}(\vartheta, \varphi). \quad (27)$$

3. *Сферическая волна, используемая в качестве функции Грина волнового уравнения.* Пусть \mathbf{r} и \mathbf{r}' — два радиус-вектора, направления которых характеризуются соответственно сферическими углами ϑ , φ и ϑ' , φ' и пусть γ — угол между ними, тогда

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \frac{1}{rr'} \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \Gamma_l(r, r') Y_{l,0}(\cos \gamma), \quad (28a)$$

где

$$\Gamma_l(r, r') = \begin{cases} \frac{i}{k} j_l(kr) h_l^{(1)}(kr') & \text{при } r < r', \\ \frac{i}{k} j_l(kr') h_l^{(1)}(kr) & \text{при } r > r'. \end{cases} \quad (28b)$$

В предельном случае $k \rightarrow 0$ отсюда получается хорошо известная формула

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \begin{cases} \frac{1}{r'} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r}{r'}\right)^l P_l(\cos \gamma) & \text{при } r < r', \\ \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r'}{r}\right)^l P_l(\cos \gamma) & \text{при } r > r'. \end{cases} \quad (29)$$

Гипергеометрическая функция

Дифференциальное уравнение

$$z(1-z)v'' + \{(c-2\lambda) - (a+b+1-2\lambda-2\mu)z\}v' + \left\{ \frac{\lambda(\lambda-c+1)}{z} + \frac{\mu(\mu-a-b-c)}{1-z} - [(\lambda+\mu)(\lambda+\mu-a-b)+ab] \right\}v=0 \quad (1)$$

имеет три правильные особые точки $z=0, 1, \infty$. С помощью подстановки

$$v(z) = z^\lambda(1-z)^\mu u(z) \quad (2)$$

его можно представить в стандартной форме

$$z(1-z)u'' + [c - (a+b+1)z]u' - abu = 0. \quad (3)$$

Уравнение (3) называется гипергеометрическим дифференциальным уравнением Гаусса. Для любых значений параметров a, b, c , кроме $c = -n$, где $n=0, 1, 2, \dots$, это уравнение имеет не обращающееся в нуль при $z=0$ регулярное решение. Указанное решение, нормированное в соответствии с условием $u(0)=1$, называют гипергеометрическим рядом и обозначают посредством ${}_2F_1(a, b, c; z)$. Решая дифференциальное уравнение (3) с помощью разложения в ряд в окрестности точки $z=0$, получаем

$${}_2F_1(a, b, c; z) = 1 + \frac{ab}{c} \frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)} \frac{z^2}{2!} + \frac{a(a+1)(a+2)b(b+1)(b+2)}{c(c+1)(c+2)} \frac{z^3}{3!} + \dots, \quad (4a)$$

или

$${}_2F_1(a, b, c; z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)\Gamma(b+n)}{\Gamma(c+n)n!} z^n. \quad (4б)$$

Эта функция инвариантна по отношению к замене параметра a параметром b . Если $a = -n$ или $b = -n$, где $n=0, 1, 2, \dots$, то гипергеометрический ряд обрывается на конечном члене и вырождается в полином степени n . Соответствующие полиномы называют полиномами Якоби и определяют соотношением

$$J_n(p, q; z) = {}_2F_1(-n, p+n, q; z).$$

Полиномы Якоби образуют ортогональную систему, причем условие ортогональности имеет вид

$$\int_0^1 z^{q-1}(1-z)^{p-q} J_m J_n dz = 0 \quad \text{при } m \neq n.$$

Если $c = -n$, то гипергеометрический ряд не существует. В этом случае решение уравнения (3) можно получить с помощью предельного перехода

$$\lim_{c \rightarrow -n} \frac{{}_2F_1(a, b, c; z)}{\Gamma(c)} = \frac{\Gamma(a+n+1)\Gamma(b+n+1)z^{n+1}}{\Gamma(a)\Gamma(b)(n+1)!} \times \\ \times {}_2F_1(a+n+1, b+n+1, n+2; z). \quad (5)$$

Если ни один из параметров a, b, c не является целым отрицательным числом или нулем, то ряд (4б) сходится абсолютно и равномерно при $|z| < 1$. Гипергеометрический ряд можно однозначно продолжить во внешность единичной окружности $|z| > 1$ с разрезом по лучу $[1, \infty]$.

Для аналитического продолжения можно воспользоваться формулами

$${}_2F_1(a, b, c; z) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} {}_2F_1(a, b, a+b-c+1; 1-z) + \\ + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (1-z)^{c-a-b} {}_2F_1(c-a, c-b, c-a-b+1; 1-z) \quad (6)$$

и

$${}_2F_1(a, b, c; z) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} {}_2F_1\left(a, a-c+1, a-b+1; \frac{1}{z}\right) + \\ + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)} (-z)^{-b} {}_2F_1\left(b, b-c+1, b-a+1; \frac{1}{z}\right). \quad (7)$$

Применяя последнюю формулу, можно записать асимптотику функции ${}_2F_1$ при $z \rightarrow \infty$:

$${}_2F_1(a, b, c; z) \rightarrow \frac{\Gamma(c)\Gamma(b-a)}{\Gamma(b)\Gamma(c-a)} (-z)^{-a} + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a-b)}{\Gamma(a)\Gamma(c-b)} (-z)^{-b}. \quad (8)$$

Общее решение гипергеометрического дифференциального уравнения при $|z| < 1$ можно представить в виде

$$u = C_{12} {}_2F_1(a, b, c; z) + C_2 z^{1-c} {}_2F_1(a+1-c, b+1-c, 2-c; z). \quad (9)$$

Исключение составляет случай $c = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, так как при этом оба частных решения, как непосредственно видно из соотношения (5), совпадают. Второе линейно независимое решение в этом случае имеет логарифмическую особенность в точке $z = 0$.

Ниже приводится сводка формул, наиболее важных с точки зрения практических приложений гипергеометрической функции

$${}_2F_1(a, b, c; z) = \frac{a(c-b)}{c(a-b)} {}_2F_1(a+1, b, c+1; z) + \\ + \frac{b(c-a)}{c(b-a)} {}_2F_1(a, b+1, c+1; z) = \frac{c-a}{c} {}_2F_1(a, b, c+1; z) + \\ + \frac{a}{c} {}_2F_1(a+1, b, c+1; z),$$

$$\begin{aligned}
{}_2F_1(a, b, c; z) &= \frac{c-1}{a-b} [{}_2F_1(a-1, b, c-1; z) - \\
&- {}_2F_1(a, b-1, c-1; z)] = \frac{c-1}{a-1} [{}_2F_1(a-1, b, c-1; z) - \\
&- {}_2F_1(a-1, b-1, c-1; z)] = \frac{c-a}{a-b} {}_2F_1(a-1, b, c; z) + \\
&\quad + \frac{c-b}{b-a} {}_2F_1(a, b-1, c; z) + {}_2F_1(a, b, c; z), \\
(1-z) {}_2F_1(a, b, c; z) &= \frac{c-1}{a-1} {}_2F_1(a-1, b-1, c-1; z) + \\
&\quad + \frac{a-c}{a-1} {}_2F_1(a-1, b, c; z).
\end{aligned}$$

Формулы для производных:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dz} {}_2F_1(a, b, c; z) &= \frac{ab}{c} {}_2F_1(a+1, b+1, c+1; z), \\
z(1-z) \frac{d}{dz} {}_2F_1(a, b, c; z) &= \frac{a(c-a)}{a-b} {}_2F_1(a-1, b, c; z) + \\
&+ \frac{b(c-b)}{b-a} {}_2F_1(a, b-1, c; z) + \frac{b(c-b)-a(c-a)}{a-b} {}_2F_1(a, b, c; z).
\end{aligned}$$

Вырожденная гипергеометрическая функция

Если в гипергеометрическом дифференциальном уравнении Гаусса сделать предельный переход $b \rightarrow \infty$, $z = x/b$, то в результате получится дифференциальное уравнение Куммера:

$$x \frac{d^2 u}{dx^2} + (c-x) \frac{du}{dx} - au = 0. \quad (1)$$

При этом особая точка $z = 1$, имевшаяся в исходном уравнении, сместится теперь в точку $x = \infty$. Таким образом, на комплексной плоскости x рассматриваемое уравнение имеет правильную особую точку $x = 0$ и существенно особую точку $x = \infty$, появившуюся в результате слияния особых точек $z = 1$ и $z = \infty$.

Общее решение уравнения (1) можно записать в виде

$$u = C_1 {}_1F_1(a, c; x) + C_2 x^{1-c} {}_1F_1(a-c+1, 2-c; x), \quad (2)$$

где так называемый вырожденный гипергеометрический ряд ${}_1F_1$ по определению равен

$${}_1F_1(a, c; z) = 1 + \frac{a}{c} \frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)}{c(c+1)} \frac{z^2}{2!} + \frac{a(a+1)(a+2)}{c(c+1)(c+2)} \frac{z^3}{3!} + \dots \quad (3a)$$

или

$${}_1F_1(a, c; z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(a+n)}{\Gamma(c+n)} \frac{z^n}{n!}. \quad (3b)$$

Этот ряд абсолютно сходится во всей комплексной плоскости z . Определяемую вырожденным гипергеометрическим рядом функцию можно сделать однозначной, проведя разрез между точками $z=0$ и $z=\infty$. В нашей книге в качестве линии разреза выбрана мнимая положительная полуось.

Если $c = -n$, где $n = 0, 1, 2, \dots$, то ряд (3б) не существует. В этом случае решение уравнения (1) можно получить с помощью предельного перехода

$$\lim_{c \rightarrow -n} \frac{{}_1F_1(a, c; z)}{\Gamma(c)} = \frac{\Gamma(a+n+1)}{\Gamma(a)} \frac{z^{n+1}}{(n+1)!} {}_1F_1(a+n+1, n+2; z). \quad (4)$$

(Выше переменная x обозначена через z .)

Асимптотическое поведение вырожденной гипергеометрической функции при $|z| \rightarrow \infty$ описывается формулой

$${}_1F_1(a, c; z) \rightarrow e^{-i\pi a} \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} z^{-a} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^z z^{a-c}. \quad (5)$$

Эта формула не относится к случаю $a = -n$, где $n = 0, 1, 2, \dots$, так как, согласно (3), вырожденный гипергеометрический ряд в указанном случае превращается в полином степени n . Среди таких полиномов наибольший интерес представляют полиномы Лягерра

$$L_n^{(m)}(z) = \frac{(n+m)!}{n!m!} {}_1F_1(-n, m+1; z) \quad (6)$$

и полиномы Эрмита (см. задачу 30)

$$\begin{aligned} H_{2n}(z) &= (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} {}_1F_1\left(-n, \frac{1}{2}; z^2\right), \\ H_{2n+1}(z) &= (-1)^n \frac{(2n+1)!}{n!} 2z {}_1F_1\left(-n, \frac{3}{2}; z^2\right). \end{aligned} \quad (7)$$

В заключение приведем сводку наиболее важных в практическом отношении формул для вырожденной гипергеометрической функции и ее производной:

$$\begin{aligned} {}_1F_1(a, c; z) &= \frac{a}{c} {}_1F_1(a+1, c+1; z) + \frac{c-a}{c} {}_1F_1(a, c+1; z) = \\ &= e^z {}_1F_1(c-a, c; -z), \\ z \frac{d}{dz} {}_1F_1(a, c; z) &= a [{}_1F_1(a+1, c; z) - {}_1F_1(a, c; z)], \\ \frac{d}{dz} {}_1F_1(a, c; z) &= \frac{a}{c} {}_1F_1(a+1, c+1; z). \end{aligned}$$

Некоторые функции, определяемые интегралами

Интеграл ошибок и связанные с ним функции. Интеграл ошибок определяют равенством

$$\operatorname{erfc} z = \int_z^{\infty} e^{-t^2} dt.$$

Часто используется несколько иное определение:

$$\operatorname{erf} z = \int_0^z e^{-t^2} dt = z {}_1F_1\left(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}; -z^2\right)$$

Указанные интегралы связаны соотношением

$$\operatorname{erfc} z + \operatorname{erf} z = \int_0^{\infty} e^{-t^2} dt = \frac{1}{2} \sqrt{\pi}.$$

Функцию $\operatorname{erf} z$ можно записать в виде ряда

$$\operatorname{erf} z = z - \frac{z^3}{1!3} + \frac{z^5}{2!5} - \dots$$

При больших действительных и положительных значениях z имеет место асимптотическое представление

$$\operatorname{erfc} z \rightarrow \frac{e^{-z^2}}{2z} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(2n)!}{2^{2n} n!} z^{-2n} = \frac{e^{-z^2}}{2z} \left(1 - \frac{1}{2z^2} + \frac{3}{4z^4} \dots\right).$$

Дифференцируя тождество

$$F(z, \beta) = \int_z^{\infty} e^{-\beta t^2} dt = \beta^{-1/2} \operatorname{erfc}(\sqrt{\beta} z),$$

нетрудно показать, что

$$\frac{\partial F}{\partial \beta} = - \int_z^{\infty} t^2 e^{-\beta t^2} dt = -\frac{1}{2} \beta^{-3/2} \operatorname{erfc}(\sqrt{\beta} z) - \frac{z}{2\beta} e^{-\beta z^2}.$$

Полагая здесь $\beta = 1$, получаем

$$\int_z^{\infty} t^2 e^{-t^2} dt = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} z + \frac{z}{2} e^{-z^2}.$$

Аналогичным образом путем повторного дифференцирования все интегралы вида

$$\int_z^{\infty} t^{2n} e^{-t^2} dt$$

можно свести к функции ошибок. В частности, при $z=0$ получается формула

$$\int_0^{\infty} t^{2n} e^{-t^2} dt = \sqrt{\pi} \frac{(2n-1)!}{2^{2n} (n-1)!}.$$

С помощью замены переменной $t^2 = x$ ее можно записать через интеграл Эйлера:

$$\int_0^{\infty} t^{2n} e^{-t^2} dt = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} x^{n-1/2} e^{-x} dx = \frac{1}{2} \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right).$$

Интегральная показательная функция. Эту функцию определяют равенством

$$\text{Ei } z = \int_{-\infty}^z \frac{e^t}{t} dt.$$

Особый интерес представляет случай $z = -x$, где x — действительное положительное число. В этом случае полагают

$$\text{E}_1(x) = -\text{Ei}(-x) = \int_x^{\infty} \frac{e^{-t}}{t} dt.$$

Функцию E_1 можно записать в виде ряда

$$\text{E}_1(x) = -C + \ln \frac{1}{x} + x - \frac{x^2}{2!2} + \frac{x^3}{3!3} - \dots,$$

где

$$C = \int_0^{\infty} e^{-t} \ln \frac{1}{t} dt = 0,577\ 215\dots$$

— так называемая постоянная Эйлера. При $x \gg 1$ имеет место асимптотическое представление

$$\text{E}_1(x) = \frac{e^{-x}}{x} \left(1 - \frac{1!}{x} + \frac{2!}{x^2} - \dots \right).$$

Можно ввести обобщенную интегральную показательную функцию:

$$E_n(x) = \int_x^{\infty} \frac{e^{-t}}{t^n} dt.$$

Фигурирующий здесь интеграл можно свести к функции $E_1(x)$, если принять во внимание соотношение

$$E_n(x) = \frac{1}{n-1} [x^{n-1}e^{-x} - E_{n-1}(x)],$$

получающееся интегрированием по частям.

Предметный указатель к 1-му и 2-му томам

Цифры указывают номера задач, а не страниц. Задачи 1—128 составляют содержание 1-го тома, задачи 129—219—2-го тома. Буква П относится к математическому приложению, помещенному в конце 2-го тома.

- Аксиальный вектор, см. Псевдовектор
Амальди поправка к модели атома Томаса—Ферми 173
Амплитуда волновой функции, ее изменение 26, 27
— рассеяния вперед 21, 22, см. также Рассеяние
— — назад 21, 22
Ангармонический осциллятор 35, 69, 70
Аномальное рассеяние 85, 112
— — протонов на протонах 165
Антикоммутирующие свойства матриц Дирака 189
— — — Паули 131
Антисимметризованное произведение 152
Атома радиус 173
Атомы щелочных металлов, рассеяние неупругое на них 166
— — — электрическая восприимчивость 159
- Барьер потенциальный 19, 21—23
Бегущая волна 16
Белый карлик 171
Бесконечно малые вращения 47
Бесселя функции, основные формулы П
Бете—Пайерлса формула 90
Блоха теорема 28
Бозе статистика 210, 213
Бора магнетон 127
Борна—Оппенгеймера приближение 44, 161, 163
Борна приближение 94, 96—98, 102, 105—107, 183, 184, 211
- Борновский интеграл, расходимость 105, 108
Брейта—Вигнера формула 114
Бриллюэна зоны 29
- Ван-дер-Ваальса силы 161
Вариационный принцип Швингера 95
— — Шредингера 2
Вектор в теории Дирака 192
Векторная частица 52
Векторный потенциал 125
— — разложение его по плоским волнам 212
Вентцеля—Крамерса—Бриллюэна метод, см. Метод ВКБ
Вершина 219
Вигнера—Эккарта теорема 133
Вириала теорема в случае кулоновских сил 151, 175
— — для возбужденных состояний гелия 155
Виртуальный уровень 26, 27
Вместимость потенциальной ямы 25, 63, 68, 106
- Водорода атом 67
— — время жизни возбужденных состояний 215
— — интенсивность спектральных линий 217
— — как задача двух тел 150
— — релятивистская теория 202, 203
— — собственные функции в импульсном представлении 78
— — таблица собственных функций 67
— молекула, ион 44

- Водорода молекула нейтральная, основное состояние 163
 — — рассеяние медленных нейтронов на ней 147
 Водородная звезда 171
 Возмущение, см. Периодическое возмущение
 — световой волной 186
 Волновой пакет 17
 Восприимчивость диамагнитная и парамагнитная 128, 160, 168
 — электрическая 159
 Вращательные уровни двухатомной молекулы 69—71
 Вращений группа 46, 52
 Времени обращение 16
 Время жизни возбужденных состояний 215
 Вронскиан 24, 28, П
 Вуда—Саксона потенциал 64
 Вырождение газа электронов 167
 — при наличии возбуждения 162
 — собственных значений 42, 46
 Вырожденная гипергеометрическая функция 30, 42, 65, 70, 110, 111, 202—204
 — — — формулы П
- Газ атомных электронов, см. Модель атома Томаса—Ферми
 — электронов в белом карлике 171
 — — проводимости в металле 167, 168
 Гайтлера—Лондона приближение 163
 Гамильтониан, зависящий от времени 11
 — при наличии спин-орбитального взаимодействия 136
 Гармонические колебания линейной молекулы 149
 Гармонический осциллятор в абстрактном гильбертовом пространстве 31, 33
 — — — представлении импульсном 34
 — — — координатном 30
 — — — приближении ВКБ 118
 — — таблица собственных функций 30
 Гейзенберга картина 10
 — соотношение неопределенности 17, 40
 Гелий, возбужденные состояния 155, 156
 — основное состояние 154
 Генераторы группы вращений 52
 Гильбертово пространство для гармонического осциллятора 31
 — — — оператора момента 65
 — — — спиновых операторов 129, 139
- Гильбертово пространство состояний 6, 10, 12, 31, 33, 50
 Гипергеометрическая функция 37—39, 46, 64, 68, 207
 — — формулы П
 Главное квантовое число 67
 Грина функция для парциальных волн 94, 96
 — — — трехмерной задачи 94
 Групповая скорость 16, 17
- Давление электронного газа 167, 171
 Два атомных электрона в основном состоянии 154
 Две частицы на гладкой окружности 148
 Двухуровневая система 179, 180
 Дейтерий, открытие 150
 Дейтрон, модель с взаимодействием тензорным 144, 145
 — — — центральным 72, 75
 — — — жесткой сердцевиной 91, 92
 — связанное состояние и длина рассеяния нейтронов на протонах 147
 Дельта-функция, представление в виде интеграла Фурье 14
 Деполяризация дираковской плоской волны 208
 Диамагнетизм 128, 160
 Диполь-дипольное взаимодействие 161, 162
 Диполь магнитный 127
 Дипольное излучение 213—215
 — — правила отбора 216
 Дипольные переходы 43, 79, 213—216
 Дирака гамильтониан 189, 200
 — теория возмущений 181—183
 — уравнение для одномерного случая 197, 207
 — — квадрирование 189
 — — лоренц-инвариантность 191
 — — пространственная инверсия 193
 — — расщепленная форма 200
 — — стандартное представление 189
 Дисперсии закон для релятивистских волн материи 189
 Дисперсия света 187
 Дифференциальное сечение рассеяния 80
 Диффузии уравнение 16
 Дублетные спиновые функции 146, 147, 194
- Жесткая сфера, рассеяние на ней 84, 109

- Лоренцевы коварианты 192
 Лоренц-инвариантность уравнения Дирака 191
 Лягерра полиномы П
- Магнетон Бора** 127
Магнитное квантовое число 127
 — поле, спиновой резонанс в нем 138
 — — уравнение Шредингера 125
Магнитные свойства ферми-газа 168
Магнитный момент дейтрона 145
 — — дипольный 127
 — — неона 160
 — — обусловленный орбитальным движением 127
 — — спиновых состояний, среднее значение 135
 — — электрона 136, 138
 — резонанс 183
Матричное представление оператора 6, 33
Магье уравнение 148
Мезоатом 74
Металл, парамагнитная восприимчивость 168
Метод ВКБ, в задаче о коэффициенте прохождения 169
 — — граничное условие Лангера 117, 118
 — — для радиальных волновых функций 116
 — — — уровней энергии 118—120
 — — — фаз рассеяния 121—123
Метрика четырехмерного пространства 189
Модифицированные функции Гесселя, формулы П
Молекула водорода, см. Водорода молекула
 — двухатомная 69—71
 — как симметричный волчок 46
 — трехатомная, нормальные колебания 149
Молекулярные потенциалы 44, 69, 70
Момент количества движения 4
 — — в задаче о симметричном волчке 46
 — — — релятивистской теории 201
 — — — для двух частиц на гладкой окружности 148
 — — — и связанный с ним магнитный момент 127
 — — — как переменная на комплексной плоскости 113
 — — — компоненты оператора в сферических координатах 48
- Момент количества движения, оператор** 42
 — — операторы компонент, их определение с помощью бесконечно малых вращений 47
 — — — перестановочные соотношения 50, 51
 — — — — с компонентами тензора 53, 54
 — — — разложение амплитуды рассеяния 82
 — — — — плоской волны 81, 136, 205
 — — — связь с оператором Лапласа 49
Момент силы 4
Морса потенциал 70, 71
- Наблюдаемые и повторное измерение** 12
Намагниченность 128
Неймана ряд 94, 105
 — функции, основные формулы П
Нейтрино теория 200
Неоднородное дифференциальное уравнение 94
Неон, диамагнитная восприимчивость 160
Непрерывности уравнение 1, 21
Непрерывный спектр 26, 219
Неприводимое представление группы матриц 189
Неупругое рассеяние 166
Низкоэнергетическое рассеяние 83, 88, 89
 — — и связанное состояние 90, 147
 — — на потенциале Пешля—Теллера 93
Нормировка 1, 14, 15
Нормировочный объем 183
Нулевые колебания поля излучения 212
- Обменный интеграл** 44
 — — для возбужденных состояний гелия 155, 156
 — — — задачи многих частиц 153
 — — — нейтральной молекулы водорода 163
 — — — основного состояния лития 158
Однородное электрическое поле, движение электрона в нем 41
Окружность с двумя точечными массами на ней 148
Оператор магнитного момента 135
Операторы в пространстве числа частиц 210

- Оптическая теорема 104
 Орбитальный момент, см. также Момент количества движения
 — — среднее значение в релятивистской теории 203
 Ортоводород, спиновые функции 147
 Ортогелий 155, 156
 Ортогональная система функций 2
 Ортогональность сферических гармоник 57
 Осциллятор ангармонический 35, 69, 70
 — гармонический 30, 31, 33, 34, 118
 — изотропный 65
 — круговой 42
 Отражения закон 45, 208
 Ошибок функция П
- Параболические координаты П
 Параводород, спиновые функции 147
 Парагелий 155, 156
 Парамагнетизм 128, 168
 Парамагнитный резонанс 180
 Парциальное сечение 84, 87
 Парциальные волны 81, 82, 205
 — — разложение по ним амплитуды рассеяния 82, 83
 — — — — в случае кулоновского рассеяния 111
 — — — — плоской волны 81
 — — — — трехмерной функции Грина 91
 Паули матрицы 52, 129, 130, 189
 — — их алгебра 131
 — принцип 152, 157
 Перекрытия интеграл 44, 156, 158, 163
 Перестановка частиц 152, 153
 Перестановочные соотношения 7, 8
 — — для волновых операторов 210
 — — — компонент оператора спина 129
 — — с гамильтонианом 10
 Перехода вероятность 182, 183, 186, 211, 213
 Периодический потенциал 28, 29
 Периодическое возмущение двухуровневой системы 180
 Периодичности куб 15, 210
 Пешля — Теллера потенциалы 38, 39, 93
 Плоская волна, наклонное падение 45, 208
 — — описывающая нерелятивистскую частицу со спином 137
 — — — релятивистскую частицу со спином 190
- Плоская волна, разложение по парциальным волнам 81, 136, 205
 Плотность вероятности 1, 16, 17, 126
 — импульса I
 — конечных состояний 183, 186, 211, 213
 — массы I
 — состояний электронов в ферми-газе 167
 — тока вероятности 1, 16, 17, 80, 126
 — электрического тока 1, 213
 — — — в теории Дирака 198, 199, 207, 209
 — энергетических уровней 26
 Показатель преломления 187
 Поле центральных сил, релятивистский электрон в нем 201
 — — — и спин электрона 133
 Политропа 171
 Полное отражение 45
 Полный момент количества движения 133, 142, 201
 Полупроницаемая перегородка 19—22, 27, 86
 Поляризационный ток 199
 Поляризация дипольного излучения 214, 216
 — плоской дираковской волны 208
 Полярзуемость атома 159
 Поперечная волна 212
 Последовательные приближения для решения интегрального уравнения 94, 96, 105
 Потенциал, имеющий вид степени длины рассеяния 99, 100
 Потенциальная ступенька 37
 — — в теории Дирака 207
 — энергия, плотность 5
 — яма 25
 Правила отбора для дипольного излучения 216
 Преломления закон 45, 208
 Приведенная масса 72, 75, 150
 Прицельное расстояние 104, 185
 Производные операторов по времени 8, 10, 11
 Прохождение дираковских частиц через потенциальный барьер 207
 Прошедшей волны интенсивность 21, 22, 23, 39, 45, 207, 209
 Псевдовектор 192, 193
 Псевдоскаляр 102, 193
 Пуассона уравнение 156, 172—174
- Работа выхода 169
 Равновесное межатомное расстояние в молекуле водорода 163

- Радиальная компонента оператора импульса 59
- Радиальные волновые функции в приближении ВКБ 116
- Рассеяние в квантовой теории поля 211
- дираковских электронов в поле центральных сил 206
- и золотое правило 183, 211
- на жесткой сфере 84, 109
- — сферической полости 86, 88
- нейтронов на молекулярном водороде 147
- неупругое 166
- одинаковых частиц 164
- одномерная модель 21—23
- протонов на протонах 165
- Рассеяния амплитуда, разложение по парциальным волнам 82, 85
- — сходимость разложения по парциальным волнам 83, 103
- длина 84, 92, 95
- — для потенциала, имеющего вид степени 99, 100
- — — — Юкавы 102
- — — — рассеяния нейтронов на протонах 147
- — — — сферически симметричной прямоугольной ямы 89 101
- — ее знак 88, 147
- сечение, определение 80
- Рассеянная волна, интерференция с падающей волной 80, 82, 105
- Редже полюсы и траектории 113, 114
- Резерфорда рассеяние 108, 110
- — одинаковых частиц 164
- Резонанс при периодическом возмущении 180, 182
- Резонансная напряженность поля 138
- Резонансное поглощение 182
- рассеяние 84, 86
- Резонансный знаменатель 182, 186, 187
- уровень 27
- Риккати уравнение 115
- Ритга вариационный метод 44, 72, 74, 75
- — — для дифференциального уравнения Томаса — Ферми 177
- — — — нейтральной молекулы водорода 163
- — — — состояний атома гелия 154, 156
- Ротатор 43, 79
- Сабатера преобразование 124
- Самоспряженный оператор, см. Эрмитов оператор
- Свободное падение в квантовой механике 40, 119
- Связанное состояние и низкоэнергетическое рассеяние 90, 147
- Связи энергия 90
- Силы осцилляторов 187
- электростатического изображения, влияние на холодную эмиссию 170
- Симметризация в многочастичных задачах 152
- — двухчастичных спиновых функций 139
- — резерфордовской амплитуды рассеяния в случае одинаковых частиц 164, 165
- — состояний атома гелия 155, 156
- — трехчастичных спиновых функций 146
- Симметричный волчок 46
- Синглетная спиновая функция 139
- Скаляр 192
- Слэтера определитель 152, 153, 158
- Смесь *S*- и *D*-состояний 143—145
- Собственные векторы спиновых операторов 130
- значения оператора Гамильтона см. Энергии уровни
- спиноры полного момента количества движения 133, 137, 142, 201
- функции для атома водорода, таблица 67
- — — гармонического осциллятора, таблица 30
- Собственный магнитный момент электрона 136, 138
- Сохранение вероятности 1
- заряда 1
- энергии 5
- Спектральная линия, интенсивность 213, 217
- — форма 182
- Спектр энергетический тормозного излучения 219
- Спин векторной частицы 52
- двухэлектронного состояния 139
- его преобразование при пространственных поворотах 132
- трехэлектронного состояния 146
- электрона, среднее значение компонент 196
- Спиновый обменный оператор 140
- резонанс 138
- Спин-орбитальное взаимодействие 136
- Спинор в нерелятивистской теории 132
- и одномерное уравнение Дирака 197

- Спинор преобразования Лоренца для него 191
 Спин-флип в магнитном поле 188
 Спиральности оператор в теории Дирака 190
 — — для одномерных задач 197
 Спиральность 137
 — нейтрино 200
 — плоской дираковской волны 190, 195, 196
 — среднее значение 196, 208
 Стандартное представление матриц Дирака 189
 Статистика квантовая 167—178
 Стационарное состояние 16
 Стирлинга формула Π
 Стоячая волна 18
 Ступенька, см. Потенциальная ступенька
 Сферические гармоники второго порядка, тензорные свойства 54
 — — ортогональность 57
 — — основные формулы Π
 — — преобразование при поворотах 55
 — — разложение плоской волны по ним 81, 136, 205
 — — таблица 67
 — координаты Π
 — функции Бесселя 62, 63, 81, 83, 87, 108, 109
 — — интегральное представление 81
 — — формулы Π
 Сферически симметричная прямоугольная яма 63, 89
 — симметричное распределение заряда, рассеяние на нем 108

 Тайтца приближение для модели атома Томаса—Ферми 176—178
 Твердое тело в квантовой механике 46
 Тензор в теории Дирака 192
 — перестановочные соотношения с компонентами момента количества движения 53, 54
 Тензорные силы 143
 Теория возмущений в задаче о взаимодействии нейтральных атомов 161, 162
 — — — применении к вычислению электрической восприимчивости 159
 — — Дирака 181—183
 — — для ангармонического осциллятора 35

 Теория возмущений, расчет двухуровневой системы 43
 — — расчет изотопического сдвига уровней 73
 — — магнитной восприимчивости 128
 — — — уровней энергии мезоатома 74
 — — — эффекта Штарка 43, 79
 Ток проводимости в релятивистской теории 199
 Томаса поправка 136
 Томаса—Ферми модель атома 172—178
 Томсона формула 218
 Тонкая структура уровней атома водорода в нерелятивистской теории 136
 — — — — — релятивистской теории 203
 Трехатомная молекула 149
 Триpletные спиновые функции 139
 Туннельный эффект 23
 — — и холодная эмиссия 169, 170

 Угловая зависимость дипольного излучения 214
 — — сечения фотоэффекта 186
 Умножения таблица в алгебре спинорных матриц 131
 Умова—Пойнтинга вектор 5
 Унитарное преобразование 10, 50
 Унитарные матрицы двухрядные 130
 Упругое рассеяние, см. Рассеяние
 Уравнение непрерывности 1, 21

 Фаза рассеяния 82, 84—87, 93
 — — в приближении ВКБ 121, 122
 — — — случае потенциала Юкавы 106
 — — — экспоненциального потенциала 107
 — — вычисление с помощью интегрального уравнения 94
 — — определение методом последовательных приближений 96, 97
 Фазовая скорость 16
 Ферми газ 167
 — статистика 210, 213
 — энергия 167, 168
 Флоке теорема 28
 Формфактор 108
 Фотон, вероятность излучения 213
 Фотоэффект 186
 Френеля формула 45
 Фурье интеграл 14, 15, 17
 — преобразование 14, 34, 76, 184
 — — потенциала 77

 Ханкеля функции 63, 82, 83, 117, 185
 — — формулы Π

- Холодная эмиссия 169, 170
 Хорошее квантовое число 133
 Хюльтена потенциал 68
- Центральные силы, зависящие от спина 140, 147
 — — импульсное представление 76, 77, 91
 Центр масс, его движение 150
 — — трехатомной молекулы 149
 Цилиндрические координаты П
- Четности преобразование для уравнения Дирака 193
 Четность 18—20, 22, 25, 26, 143
- Швингера вариационный принцип 95
 Шредингера картина 10
 — поле, его квантование 210
 Штарка эффект для двухмерного ротатора 43
 — — — трехмерного ротатора 79
- Эйконал 115
 Эйлера углы 46, 55
 Эйри функция 40, 41, 117, П
 Экранированные водородоподобные функции 154—157, 160
 Экранировка К-электронов в тяжелых атомах 178
 — ядерного заряда 156
 Экранировочные постоянные 154, 157, 160
 Экспоненциальный потенциал 75
 — — рассеяние на нем 107
 Электрическая восприимчивость 159
 Электронный спиновый резонанс 138
- Электроны проводимости в металле 167, 168
 Эллипсоидальные координаты 44, П
 Эллиптические интегралы 170
 Энергетические зоны 28, 29
 — уровни ангармонического осциллятора 35
 — — атома водорода 67, 203
 — — гармонического осциллятора 30
 — — двухатомной молекулы 69—71
 — — частицы в гравитационном поле у поверхности земли 40, 119
 — — — — случае потенциала Пешля—Теллера 38, 39
 — — — — — Хюльтена 68
 — — — — — прямоугольной ямы с полупроницаемой перегородкой 19
 Энергии сохранение 5
 Энергия вакуума 212
 — ионизации для гелия и гелиеподобных ионов 154, 155
 — полная в модели атома Томаса—Ферми 174
 Эрмита полиномы 30, 32, П
 Эрмитово сопряжение 6, 31
 — сопряженный оператор 6, 7, 59
 Эффективное сечение, см. Рассеяние
 — — и вероятность перехода 183
 — — комптоновского рассеяния 218
 — — тормозного излучения 219
 Эффективный радиус взаимодействия 88, 89
- Юкавы потенциал 72
- Ядро атомное, влияние его размеров на энергию связи электронов 73
 — интегрального уравнения, симметризация 94