

П. В. ЕЛЮТИН,
В. Д. КРИВЧЕНКОВ

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА С ЗАДАЧАМИ

*Под редакцией
академика Н. Н. Боголюбова*

Издание второе, переработанное



МОСКВА
ФИЗМАТЛИТ
2001



УНЦ довузовского
образования МГУ
2001

УДК 530.145

ББК 530.1

Е59

ЕЛЮТИН П. В., КРИВЧЕНКОВ В. Д. **Квантовая механика (с задачами)** / Под ред. Н. Н. Боголюбова; изд. 2-е, перераб. — М.: ФИЗМАТЛИТ; УНЦ довузовского образования МГУ, 2001. — 304 с. — ISBN 5-9221-0077-7.

Изложены физические основы и математический аппарат нерелятивистской квантовой механики.

Большое внимание уделено методам вычислений, в особенности приближенным. Кроме большого числа примеров в тексте, в книгу включено свыше 200 задач, предназначенных для самостоятельного решения.

Для студентов физических факультетов университетов.

Ил. 47. Библиогр. 19 назв.

ISBN 5-9221-0077-7

© УНЦ довузовского
образования МГУ, 2001

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие к первому изданию	4
<i>Глава первая</i>	
Введение	5
<i>Глава вторая</i>	
Основные положения	24
<i>Глава третья</i>	
Одномерное движение	37
<i>Глава четвертая</i>	
Момент	59
<i>Глава пятая</i>	
Центральное поле	78
<i>Глава шестая</i>	
Теория возмущений и вариационный метод	96
<i>Глава седьмая</i>	
Квазиклассическое приближение	117
<i>Глава восьмая</i>	
Электрическое поле	134
<i>Глава девятая</i>	
Рассеяние	147
<i>Глава десятая</i>	
Релятивистские поправки	177
<i>Глава одиннадцатая</i>	
Переходы	190
<i>Глава двенадцатая</i>	
Магнитное поле	211
<i>Глава тринадцатая</i>	
Тождественные частицы	223
<i>Глава четырнадцатая</i>	
Атом	238
<i>Глава пятнадцатая</i>	
Двухатомная молекула	261
<i>Глава шестнадцатая</i>	
Взаимодействие с электромагнитным полем	269
Некоторые обозначения	294
Примечания	295
Предметный указатель	299

ПРЕДИСЛОВИЕ К ПЕРВОМУ ИЗДАНИЮ

Предлагаемая книга является учебным пособием для студентов физических факультетов высших учебных заведений. В ней излагаются основы физических представлений и математического аппарата нерелятивистской квантовой механики. Особенностью этой книги и ее безусловным достоинством является краткость, достигнутая авторами не за счет упрощений, а благодаря лаконичности изложения, которая позволила осветить весь круг вопросов университетской программы в сравнительно небольшом объеме. Такой характер изложения, естественно, требует от читателя определенных усилий и сосредоточенности.

Книга является не самоучителем, не энциклопедией, а учебником, рассчитанным на то, что приступивший к его изучению уже знаком с рядом физических курсов, в частности, с курсом атомной физики, содержащим большой фактический материал. По той же причине авторы не затрагивают вопросов, относящихся собственно к специальным курсам.

Достоинством книги является также логичный и последовательный характер изложения на основе сформулированных в явном виде положений и правил. Физически строгое изложение использует во всех случаях только математический аппарат, известный студентам. Большое внимание в книге уделяется методам вычислений, в частности приближенным методам (теории возмущений, вариационному методу, методу ВКБ), не только схемам их использования, но и обсуждению условий применимости.

Важным преимуществом данной книги является наличие в ней, кроме большого числа примеров в тексте, свыше двухсот задач, которые представляют значительный методический интерес при условии самостоятельного решения их читателями. Степень трудности задач соответствует возможностям студентов.

Оригинальный и умелый методический подход авторов к широкому кругу вопросов делает эту книгу, безусловно, весьма полезной для изучения основ квантовой механики.

4 июля 1975 г.

Н.Н. Боголюбов

ВВЕДЕНИЕ

0. Одной из первых задач квантовой теории было объяснение того экспериментального факта, что наблюдаемые разности энергий атомов принимают дискретное множество значений.

Математический аппарат, пригодный для получения дискретных величин как функций параметров (таких, как заряд и масса элементарных частиц), можно строить различным образом.

1. Можно потребовать, чтобы наблюдаемые были только такие значения энергий, при которых некоторый функционал от параметров и наблюдаемых принимает значения из данного дискретного набора.

2. Можно потребовать, чтобы наблюдаемые определялись корнями некоторого уравнения, коэффициенты которого зависят от параметров.

3. Можно потребовать, чтобы наблюдаемые были собственными значениями некоторого дифференциального оператора, коэффициенты которого зависят от параметров.

Фактически в квантовой теории были использованы все три подхода. Первый лег в основу старой квантовой теории Бора (1913 г.). Второй был использован Гайзенбергом (1925 г.) при построении матричной механики. Третий был применен Шредингером (1926 г.) для создания волновой механики.

Методы Гайзенберга и Шредингера лежат в основе современной квантовой механики, аппарат которой основан на использовании линейных операторов в гильбертовом пространстве ^{*1}.

1. Определение 1. Пусть \mathcal{A} и \mathcal{B} — линейные множества. Оператор \hat{L} , преобразующий элементы множества \mathcal{A} в элементы множества \mathcal{B} , называется *линейным*, если для любых элементов f и g из \mathcal{A} и комплексных чисел α и β справедливо равенство

$$\hat{L}(\alpha f + \beta g) = \alpha \hat{L}f + \beta \hat{L}g.$$

Множество \mathcal{A} называется областью определения оператора. В дальнейшем мы чаще всего будем рассматривать различные множества функций действительной переменной. Поэтому элементы множеств \mathcal{A} и \mathcal{B} будем называть функциями.

¹ Здесь и далее звездочка в тексте отсылает читателя к примечаниям в конце книги.

Определение 2. Произведение операторов $\widehat{L}\widehat{M}$ обозначает оператор, действие которого на функцию ψ заключается в последовательном действии оператора \widehat{M} на ψ , а затем оператора \widehat{L} на $\varphi = \widehat{M}\psi$. В общем случае в произведении операторов существен их порядок:

$$\widehat{L}\widehat{M}\psi \neq \widehat{M}\widehat{L}\psi,$$

т. е. умножение операторов некоммутативно.

Определение 3. Оператор

$$[\widehat{A}, \widehat{B}] = \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}$$

называется *коммутатором* операторов \widehat{A} и \widehat{B} . Если произведение операторов не зависит от их порядка ($[\widehat{A}, \widehat{B}] = 0$), то операторы называются коммутирующими.

Определение 4. Оператор \widehat{I} называется *единичным*, если для любой функции ψ

$$\widehat{I}\psi = \psi.$$

Определение 5. Оператор \widehat{M}^{-1} называется *обратным* оператору \widehat{M} , если

$$(\widehat{M}\widehat{M}^{-1})\psi = (\widehat{M}^{-1}\widehat{M})\psi = \psi.$$

Можно показать, что если $\widehat{M} = \widehat{L}\widehat{N}$, то $\widehat{M}^{-1} = \widehat{N}^{-1}\widehat{L}^{-1}$.

2. Рассмотрим класс C_∞ всех непрерывных бесконечно дифференцируемых функций действительного переменного

$$x \in (-\infty, +\infty).$$

Линейные операторы можно задавать, непосредственно указывая правило соответствия, например:

$$\widehat{Q}\psi(x) = x\psi, \quad \widehat{D}\psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}, \quad \widehat{P}\psi(x) = \psi(-x). \quad (1.1)$$

Линейность этих операторов очевидна. Многие операторы можно представить в интегральной форме:

$$\widehat{L}\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} L(x, \xi) \psi(\xi) d\xi.$$

Функция $L(x, \xi)$ называется *ядром* интегрального оператора. Ядро оператора \widehat{N} произведения интегральных операторов $\widehat{M}\widehat{L}$, если оно существует, есть

$$N(x, \xi) = \int_{-\infty}^{+\infty} M(x, y) L(y, \xi) dy.$$

В дальнейшем мы будем опускать обозначения пределов интегрирования, если интегрирование ведется по всей оси.

3. Пусть $\psi(x)$ непрерывная функция. Ядро единичного оператора, записанного в интегральной форме, называется δ -функцией Дирака *:

$$\hat{I}\psi(x) = \int \delta(x - \xi) \psi(\xi) d\xi = \psi(x).$$

С помощью δ -функции можно представить в интегральной форме многие линейные операторы. Например, ядро $Q(x, \xi)$ оператора \hat{q} , определенного первой из формул (1.1), можно представить как $\xi \delta(x - \xi)$.

4. Если независимая переменная принимает счетное множество значений, то в качестве аргумента функции можно рассматривать номера этих значений. Обозначим

$$\psi(x_n) = \psi(n) = \psi_n.$$

Аналогом интегральной формы операторов для таких функций будет матричная форма:

$$\sum L_{mn} \psi_n = \varphi_m,$$

где матрица L_{mn} играет роль ядра. Набор чисел ψ_n рассматривается как матрица с одним столбцом. Числа ψ_n можно рассматривать как компоненты вектора в n -мерном комплексном евклидовом пространстве E_n . Набор ψ_n мы будем называть вектором. Компоненты матрицы единичного оператора \hat{I} определяются символом Кронекера δ_{ik} . Матрица оператора \hat{M} произведения операторов — матриц \hat{L} и \hat{N} — есть

$$M_{in} = \sum_k L_{ik} N_{kn}.$$

5. Определение 6. Скалярным произведением функций $f(x)$ и $g(x)$ называется число

$$(f, g) = \int f^*(x) g(x) dx \quad (1.2)$$

(звездочка означает комплексное сопряжение). Очевидно, скалярное произведение конечно не для любых функций из C_∞ . В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением класса $L^2(-\infty, +\infty)$ функций, интегрируемых с квадратом на действительной прямой *. Величина

$$\|f\| = \sqrt{(f, f)} \quad (1.3)$$

называется нормой функции. Если $(f, g) = 0$, то говорят, что функции f и g ортогональны. Определенное таким образом скалярное

произведение обладает свойствами

$$\begin{aligned}(f + f', g) &= (f, g) + (f', g), \\ (f, g + g') &= (f, g) + (f, g'), \\ (f, \alpha g) &= \alpha (f, g), \\ (\alpha f, g) &= \alpha^* (f, g),\end{aligned}\tag{1.4}$$

где α — любое комплексное число.

Множество функций L^2 , на котором определены скалярное произведение (1.2) и норма (1.3), является гильбертовым пространством.

6. Скалярное произведение для векторов ψ_n пространства E_n определим соотношением

$$(\psi, \varphi) = \sum_n \psi_n^* \varphi_n = \langle \psi | \varphi \rangle.$$

Можно рассматривать это выражение как матричное произведение вектор-строки $\langle \psi |$ с компонентами ψ_n^* на вектор-столбец $|\varphi\rangle$ с компонентами φ_n . При этом входящие в скалярное произведение векторы принадлежат разным пространствам: E_n^b (строки) и E_n^c (столбцы). Очевидно, что соответствие между векторами этих пространств взаимно однозначно.

Такие же обозначения можно ввести и в пространстве L^2 . Функцию $\psi(x)$ можно рассматривать как вектор $|\psi\rangle$, которому соответствует вектор из сопряженного пространства $\langle \psi | = \psi^*(x)$.

Произведение $\langle f | g \rangle$ есть, по определению, число. Произведение $|f\rangle \langle g|$ понимается как оператор, который вектору $|\psi\rangle$ ставит в соответствие вектор

$$|f\rangle \langle g | \psi \rangle = (\langle g | \psi \rangle) |f\rangle.$$

Из соотношений (1.4) следует линейность такого оператора. Число $\langle f | \hat{L} | g \rangle$ называется *матричным элементом* оператора \hat{L} между функциями f и g .

7. Определение 7. Если для любых функций ψ и φ выполняется соотношение

$$\langle \psi | \hat{L} | \varphi \rangle = (\langle \varphi | \hat{L}^+ | \psi \rangle)^*,$$

то оператор \hat{L}^+ называется *сопряженным* оператору \hat{L} .

Отметим следующие свойства сопряженных операторов:

$$\begin{aligned}\langle \psi | \hat{L} | \varphi \rangle &= (\langle \varphi | \hat{L}^+ | \psi \rangle)^* = (\langle \psi | (\hat{L}^+)^+ | \varphi \rangle)^{**} = \langle \psi | \hat{L}^{++} | \varphi \rangle, \\ (\hat{L}^+)^+ &= \hat{L}, \\ \langle \psi | \alpha \hat{L} | \varphi \rangle &= (\alpha \langle \varphi | \hat{L}^+ | \psi \rangle)^* = \alpha^* \langle \varphi | \hat{L}^+ | \psi \rangle, \\ (\alpha \hat{L})^+ &= \alpha^* \hat{L}^+.\end{aligned}\tag{1.5}$$

Для операторов-матриц в пространстве E_n имеем

$$\langle \psi | \hat{L} | \varphi \rangle = \sum_{m,n} \psi_m^* L_{mn} \varphi_n,$$

$$(\langle \varphi | \hat{L}^+ | \psi \rangle)^* = \sum_{m,n} \varphi_m L_{mn}^{+*} \psi_n^*.$$

Меняя местами индексы суммирования, находим соотношение между матрицами сопряженных операторов:

$$\sum_{m,n} \psi_m^* L_{mn} \varphi_n = \sum_{m,n} \psi_m^* (L_{nm}^+)^* \varphi_n, \quad (1.6)$$

$$L_{mn}^* = L_{nm}^+.$$

Аналогичное соотношение выполняется и для ядер сопряженных интегральных операторов в $L^2(-\infty, +\infty)$:

$$L^+(x, \xi) = L^*(\xi, x).$$

Рассмотрим оператор, сопряженный произведению операторов $\hat{M} = \hat{L}\hat{N}$:

$$\langle f | \hat{M} | g \rangle = (\langle g | \hat{M}^+ | f \rangle)^*,$$

$$\langle f | \hat{L}\hat{N} | g \rangle = (\langle \hat{N}g | \hat{L}^+ | f \rangle)^* = (\langle g | \hat{N}^+ \hat{L}^+ | f \rangle)^*,$$

$$\hat{M}^+ = \hat{N}^+ \hat{L}^+.$$

8. Определение 8. Если оператор \hat{L} совпадает со своим сопряженным оператором \hat{L}^+ , то он называется *эрмитовым*.

Так, эрмитовыми являются операторы \hat{P} и \hat{q} (см. (1.1)) в классе L^2 :

$$\langle f | \hat{q} | g \rangle = \int f^* x g dx = \left(\int g^* x f dx \right)^* = (\langle g | \hat{q} | f \rangle)^*.$$

Здесь предполагается, что как $f(x)$, $g(x)$, так и $xf(x)$, $xg(x)$ принадлежат классу L^2 :

$$\langle f | \hat{P} | g \rangle = \int f^*(x) g(-x) dx = \int f^*(-x) g(x) dx = (\langle g | \hat{P} | f \rangle)^*.$$

(Значение интеграла не зависит от обозначения переменной интегрирования.) Для любого оператора \hat{L} оператор

$$\hat{L}_s = \hat{L} + \hat{L}^+ = \hat{L}_s^+$$

будет эрмитовым в силу (1.5). Любой оператор \hat{L} можно представить в виде

$$\hat{L} = \hat{M} + i\hat{N},$$

где операторы

$$\widehat{M} = \frac{\widehat{L} + \widehat{L}^+}{2}, \quad \widehat{N} = \frac{\widehat{L} - \widehat{L}^+}{2i} \quad (1.7)$$

эрмитовы. Будем называть \widehat{M} и $i\widehat{N}$, определенные так, эрмитовой и антиэрмитовой частями оператора \widehat{L} . Оператор-матрица в пространстве E_n будет эрмитовым, если

$$L_{nm} = L_{mn}^*.$$

Отсюда, в частности, следует, что диагональные элементы эрмитовой матрицы вещественны. Для интегральных операторов условием эрмитовости будет равенство

$$L^*(x, \xi) = L(\xi, x).$$

Произведение эрмитовых операторов будет эрмитовым оператором только тогда, когда операторы коммутируют:

$$\widehat{N}^+ = (\widehat{M}\widehat{L})^+ = \widehat{L}^+\widehat{M}^+ = \widehat{L}\widehat{M}.$$

9. Определение 9. Если для оператора \widehat{L} и функции ψ ($\|\psi\| \neq 0$) выполняется соотношение

$$\widehat{L}\psi = \lambda\psi, \quad (1.8)$$

где λ — комплексное число, то ψ называется *собственной функцией*, а λ — *собственным значением* оператора \widehat{L} . Если множество собственных функций не более чем счетно, то собственную функцию ψ_n , соответствующую собственному значению λ_n , будем обозначать как $|n\rangle$. В дальнейшем мы часто будем использовать сокращения и писать СФ вместо «собственная функция» и СЗ вместо «собственное значение».

Собственные значения эрмитовых операторов действительны:

$$\begin{aligned} \widehat{L}\psi_n &= \lambda_n\psi_n, \\ \langle n|\widehat{L}|n\rangle &= \lambda_n\langle n|n\rangle = (\langle n|\widehat{L}^+|n\rangle)^* = \lambda_n^*\langle n|n\rangle, \\ \lambda_n &= \lambda_n^*. \end{aligned}$$

Собственные функции эрмитового оператора, относящиеся к различным собственным значениям, ортогональны:

$$\begin{aligned} \widehat{L}\psi_n &= \lambda_n\psi_n, \quad \widehat{L}\psi_m = \lambda_m\psi_m, \\ \langle m|\widehat{L}|n\rangle &= \lambda_n\langle m|n\rangle, \end{aligned} \quad (1.9)$$

$$\langle m|\widehat{L}^+|n\rangle = (\langle n|\widehat{L}|m\rangle)^* = \lambda_m^*\langle m|n\rangle. \quad (1.10)$$

Левые части выражений (1.9) и (1.10) равны. Приравнивая правые части, получаем

$$(\lambda_n - \lambda_m)\langle m|n\rangle = 0. \quad (1.11)$$

Так как по условию $\lambda_m \neq \lambda_n$, то $\langle m|n\rangle = 0$, что и требовалось доказать.

Для оператора \hat{P} (1.1), например, собственными функциями в пространстве L^2 являются четные ($\lambda = 1$) и нечетные ($\lambda = -1$) функции. Выполнение равенства (1.11) для СЗ оператора очевидно.

10. Определение 10. Если собственному значению λ_k оператора \hat{L} соответствует более одной собственной функции, то собственное значение λ_k называется *вырожденным*, а число g различных линейно независимых собственных функций ψ_{k_g} называется *кратностью вырождения*.

Собственные функции ψ_n , соответствующие вырожденному значению λ_k , могут быть взаимно не ортогональны. Линейные комбинации

$$\varphi_n = \sum_{i=1}^g a_{ni} \psi_i$$

также будут собственными функциями \hat{L} , относящимися к значению λ_n . Если кратность вырождения конечна (или счетна), то система функций φ_n может быть сделана ортогональной. Положим

$$\varphi_1 = \psi_1,$$

$$\varphi_2 = \psi_1 + \alpha_{22} \psi_2,$$

где α_{22} определится из условия ортогональности

$$\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle = 0 = \langle \psi_1 | \psi_1 \rangle + \alpha_{22} \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle,$$

откуда

$$\alpha_{22} = - \frac{\|\psi_1\|^2}{\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle};$$

предполагается, что норма $\|\psi_1\|$ конечна, $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \neq 0$. Аналогично, полагая

$$\varphi_3 = \psi_1 + \alpha_{32} \psi_2 + \alpha_{33} \psi_3,$$

получим систему из двух линейных уравнений для коэффициентов α_{32} , α_{33} . Такая процедура, называемая ортогонализацией по Шмидту, может быть продолжена для всех значений n до $n = g$. Ортогональную систему функций φ_i для вырожденного собственного значения мы будем называть *правильной*.

11. Определение 11. Оператор \hat{U} называется *унитарным*, если он сопряжен своему обратному оператору:

$$\hat{U} \hat{U}^+ = \hat{U}^+ \hat{U} = \hat{I}.$$

Собственные значения унитарных операторов по модулю равны единице:

$$\hat{U} |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle,$$

$$\langle \psi | \hat{U}^+ \hat{U} | \psi \rangle = \lambda \langle \psi | \hat{U}^+ | \psi \rangle = \lambda \lambda^* \langle \psi | \psi \rangle,$$

$$\lambda \lambda^* = |\lambda|^2 = 1.$$

Произведение унитарных операторов $\widehat{W} = \widehat{U}\widehat{V}$ также будет унитарным оператором:

$$\begin{aligned}\widehat{W}^+ &= \widehat{V}^+\widehat{U}^+, \\ \widehat{W}^+\widehat{W} &= \widehat{V}^+\widehat{U}^+\widehat{U}\widehat{V} = \widehat{V}^+\widehat{V} = \widehat{I}.\end{aligned}$$

Определение 12. Пусть \widehat{U} — унитарный оператор. Преобразование, при котором функции ψ сопоставляется функция $\varphi = \widehat{U}^+\psi$, а оператору \widehat{L} — оператор $\widehat{l} = \widehat{U}^+\widehat{L}\widehat{U}$, называется *унитарным преобразованием* $\{U\}$.

Унитарное преобразование обладает следующими свойствами:

а) сохраняет коммутационные соотношения:

$$\begin{aligned}[\widehat{L}, \widehat{M}] &= \widehat{N}, \\ \widehat{U}^+\widehat{L}\widehat{M}\widehat{U} - \widehat{U}^+\widehat{M}\widehat{L}\widehat{U} &= \widehat{U}^+\widehat{N}\widehat{U} = \widehat{n}, \\ \widehat{U}^+[\widehat{L}, \widehat{M}]\widehat{U} &= (\widehat{U}^+\widehat{L}\widehat{U})(\widehat{U}^+\widehat{M}\widehat{U}) - (\widehat{U}^+\widehat{M}\widehat{U})(\widehat{U}^+\widehat{L}\widehat{U}) = \widehat{l}\widehat{m} - \widehat{m}\widehat{l}, \\ [\widehat{l}, \widehat{m}] &= \widehat{n};\end{aligned}$$

б) сохраняет эрмитовость операторов; пусть $\widehat{L}^+ = \widehat{L}$. Тогда

$$\begin{aligned}(\widehat{U}^+\widehat{L}\widehat{U})^+ &= \widehat{U}^+\widehat{L}^+\widehat{U}^{++} = \widehat{U}^+\widehat{L}^+\widehat{U} = \widehat{l}^+, \\ \widehat{l}^+ &= \widehat{l};\end{aligned}$$

в) сохраняет собственные значения:

$$\begin{aligned}\widehat{L}\psi &= \lambda\psi, \\ \widehat{U}^+\widehat{L}\psi &= \lambda\widehat{U}^+\psi, \\ (\widehat{U}^+\widehat{L}\widehat{U})(\widehat{U}^+\psi) &= \lambda(\widehat{U}^+\psi), \\ \widehat{l}\varphi &= \lambda\varphi;\end{aligned}$$

г) сохраняет скалярное произведение и матричные элементы:

$$\langle \psi_1 | \widehat{L} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \widehat{U}\widehat{U}^+\widehat{L}\widehat{U}\widehat{U}^+ | \psi_2 \rangle = \langle \varphi_1 | \widehat{U}^+\widehat{L}\widehat{U} | \varphi_2 \rangle = \langle \varphi_1 | \widehat{l} | \varphi_2 \rangle.$$

12. Оператор \widehat{L} называется *ограниченным*, если существует такое число C , что для функции $f \in \mathcal{A}$ такой, что $\|f\| = 1$,

$$\|\widehat{L}f\| \leq C.$$

Значения параметра λ , для которых оператор $(\widehat{L} - \lambda\widehat{I})^{-1}$ существует, определен всюду в L^2 и ограничен, называются *регулярными точками*

оператора \hat{L} . Все остальные точки комплексной плоскости образуют *спектр* оператора \hat{L} .

Собственные значения оператора \hat{L} принадлежат его спектру. В этом случае оператор $\hat{L} - \lambda\hat{I}$, область определения которого \mathcal{A}_λ та же, что и у оператора \hat{L} , не осуществляет взаимно однозначного соответствия между \mathcal{A} и \mathcal{B}_λ . Если ψ — собственная функция \hat{L} , то из равенства

$$(\hat{L} - \lambda\hat{I})f = g$$

следует также равенство

$$(\hat{L} - \lambda\hat{I})(f + \psi) = g,$$

и неоднозначность соответствия очевидна. Таким образом, если λ есть собственное значение оператора \hat{L} , то оператор $\hat{L} - \lambda\hat{I}$ не имеет обратного. Множество собственных значений называется *дискретным спектром* \hat{L} . Кроме СЗ, в спектр входят также значения λ , при которых оператор $(\hat{L} - \lambda\hat{I})^{-1}$ существует, но определен не всюду в L^2 или не ограничен. Такие точки образуют *непрерывный спектр* \hat{L} .

Если оператор \hat{L} эрмитов, то не вещественные точки комплексной плоскости λ являются его регулярными точками. Оператор $(\hat{L} - \lambda\hat{I})^{-1}$ существует, так как

$$\lambda = \xi + i\eta \quad (\eta \neq 0)$$

не может быть собственным значением \hat{L} . Пусть

$$(\hat{L} - \lambda\hat{I})f = g.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \|g\|^2 &= \|(\hat{L} - \lambda\hat{I})f\|^2 + \eta^2 \|f\|^2, \\ \|f\| &= \|(\hat{L} - \lambda\hat{I})^{-1}g\| \leq \frac{1}{|\eta|} \|g\|. \end{aligned}$$

Последнее неравенство означает ограниченность оператора $(\hat{L} - \lambda\hat{I})^{-1}$.

В дальнейшем изложении, следуя установившейся в квантовой механике терминологии, мы все значения λ , принадлежащие спектру, будем называть *собственными значениями*. Нетривиальные решения уравнения

$$\hat{L}\psi = \lambda\psi,$$

где значение λ принадлежит спектру, мы будем называть *собственными функциями* оператора \hat{L} и в том случае, когда ψ не будет принадлежать пространству L^2 .

13. Операторы, используемые в квантовой механике, обладают полными системами собственных функций. Для эрмитовых операторов с дискретным спектром в классе L^2 это означает, что любая функция $f(x) \in L^2$ может быть представлена в виде разложения по собственным функциям ψ_n оператора \hat{L} :

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n(x), \quad (1.12)$$

где коэффициенты в разложении определяются формулой

$$a_n = \int f(x) \psi_n^*(x) dx. \quad (1.13)$$

Так как собственные функции $\psi(x)$ определены формулой (1.8) с точностью до постоянного комплексного множителя, для однозначности разложения потребуем нормированности собственных функций на единицу:

$$\|\psi_n\| = 1. \quad (1.14)$$

Если среди собственных значений оператора λ есть вырожденные, то мы будем предполагать, что в систему ψ_n включены правильные собственные функции:

$$(\psi_m, \psi_n) = \langle m|n \rangle = \delta_{mn}$$

для любых m и n . Такую систему будем называть ортонормированной. Из равенства

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\int f(\xi) \psi_n^*(\xi) d\xi \right) \psi_n(x) = \int \left(\sum_{n=1}^{\infty} \psi_n^*(\xi) \psi_n(x) \right) f(\xi) d\xi$$

следует, что выражение

$$\sum_n \psi_n^*(\xi) \psi_n(x) = \delta(x - \xi)$$

можно рассматривать как ядро единичного оператора (δ -функцию Дирака). Если эрмитов интегральный оператор обладает полной системой функций дискретного спектра ψ_n , то в силу соотношений (1.12), (1.13) его ядро может быть представлено в виде

$$L(x, \xi) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i \psi_i^*(\xi) \psi_i(x).$$

14. Пусть \hat{L} — оператор на L^2 с полной системой собственных функций ψ_n . Последовательность чисел

$$a_n = \int f(x) \psi_n^*(x) dx$$

однозначно определяет, вследствие (1.12), функцию $f(x)$. Поэтому можно считать сам набор a_n видом исходной функции $f(x)$ в представлении \hat{L} . Пусть \hat{M} — некоторый оператор на L^2 . Тогда

$$\hat{M}f(x) = \sum_n a_n \hat{M}\psi_n(x),$$

$$\hat{M}\psi_n(x) = \hat{M}\psi(n, x) = \sum_m M_{mn}\psi(m, x),$$

$$M_{mn} = \int \psi_m^*(x) \hat{M}\psi_n(x) dx.$$

Эта матрица определяет вид оператора \hat{M} в дискретном \hat{L} -представлении:

$$\hat{M}f(x) = \sum_n a_n \sum_m M_{mn}\psi_m(x) = \sum_m \psi_m(x) \sum_n M_{mn}a_n,$$

$$\hat{M}f(x) = \sum_m a'_m \psi_m(x),$$

$$a'_m = \sum_n M_{mn}a_n.$$

Можно сказать, что переход от функции $f(x)$ (функции в \hat{x} -представлении) к набору чисел a_n (функции в \hat{L} -представлении) есть результат действия унитарного оператора \hat{U}^+ , определенного условиями

$$a_n = \hat{U}^+ f(x) = \int \psi_n^*(x) f(x) dx,$$

$$f(x) = \hat{U}a_n = \sum_n a_n \psi_n(x).$$

Легко проверить унитарность оператора \hat{U}^+ :

$$\int \psi(n, x) \psi^*(m, x) dx = \hat{U}\hat{U}^+ = \hat{I} = \delta_{nm}.$$

Матрица оператора \hat{L} в своем собственном представлении диагональна:

$$L_{mn} = \int \psi_m^*(x) \hat{L}\psi_n(x) dx = \lambda_m \delta_{mn}.$$

Для определения матричных элементов необходимо найти собственные функции и собственные значения оператора \hat{L} . Если они известны, то оператор \hat{L} приведен к диагональному виду.

15. Пусть $g_n(x)$ — полная ортонормированная система собственных функций оператора \hat{K} . Функции $g_n(x)$ могут быть разложены

по СФ оператора \hat{L} :

$$g_n(x) = \sum_m A_{nm} \psi_m(x).$$

Из условия ортонормированности системы следует:

$$\int g_n^*(x) g_m(x) dx = \delta_{nm},$$

$$\begin{aligned} \int \left[\sum_k A_{kn}^* \psi_k^*(x) \right] \left[\sum_i A_{im} \psi_i(x) \right] dx &= \\ &= \sum_{i,k} A_{kn}^* A_{im} \int \psi_k^*(x) \psi_i(x) dx = \\ &= \sum_{i,k} A_{kn}^* A_{im} \delta_{ik} = \sum_k A_{kn}^* A_{km} = \delta_{nm}. \end{aligned}$$

Это условие означает, что матрица A_{nm} унитарна:

$$\hat{A} \hat{A}^+ = \hat{I}.$$

Таким образом, переход от дискретного \hat{L} -представления к дискретному \hat{K} -представлению есть унитарное преобразование, задаваемое оператором-матрицей \hat{A} . Поскольку унитарное преобразование не меняет собственных значений, то в принципе дискретный спектр любого оператора \hat{L} можно найти следующим способом. Взяв произвольную полную систему функций (например, функции Эрмита, см. п. 3.6), вычислить матричные элементы

$$L_{mn} = \int \psi_m^*(x) \hat{L} \psi_n(x) dx = \langle m | \hat{L} | n \rangle$$

и подобрать унитарную матрицу A_{kl} такую, чтобы унитарное преобразование

$$\hat{A}^+ \hat{L} \hat{A} = \hat{l}$$

приводило к диагональной матрице. Тогда элементы $l_{mm} = \lambda_m$ и будут собственными значениями оператора \hat{L} .

Однако всякая полная в L^2 система функций $\psi_n(x)$ содержит бесконечное число функций. Это означает, что все преобразования придется проводить с матрицами бесконечного порядка. Этот способ не всегда является лучшим. Кроме того, в изложенном виде метод неприменим для отыскания непрерывного спектра: очевидно, число собственных состояний любой матрицы L_{mn} счетно.

16. Эрмитовы операторы с непрерывным спектром не имеют в классе L^2 полной ортонормированной системы собственных функций. Однако собственные функции $\psi(\lambda, x)$ оператора \hat{L} с непрерывным спектром могут быть выбраны так, что будут выполняться соотношения, аналогичные (1.12) и (1.13). А именно, для любой функции $f(x)$ из L^2 будет определена функция

$$a(\lambda) = \int f(x) \psi^*(\lambda, x) dx, \quad (1.15)$$

принадлежащая L^2 и такая, что

$$f(x) = \int a(\lambda) \psi(\lambda, x) d\lambda. \quad (1.16)$$

Интегрирование по λ всюду ведется по всему непрерывному спектру. Функцию $a(\lambda)$, как и в п. 1.14, будем называть функцией $f(x)$ в L -представлении. Как и в случае дискретного спектра, функции $\psi(\lambda, x)$ определены соотношением (1.8) лишь с точностью до постоянного комплексного множителя. Модуль этого множителя определяется условиями (1.15), (1.16). Так как

$$\begin{aligned} f(x) &= \int \psi(\lambda, x) d\lambda \int f(\xi) \psi^*(\lambda, \xi) d\xi = \\ &= \int f(\xi) d\xi \int \psi^*(\lambda, \xi) \psi(\lambda, x) d\lambda, \end{aligned}$$

то функции, удовлетворяющие условиям (1.15), (1.16), называются нормированными на δ -функцию:

$$\int \psi^*(\lambda, \xi) \psi(\lambda, x) d\lambda = \delta(x - \xi). \quad (1.17)$$

Аналогично, при подстановке (1.16) в (1.15) получим

$$\begin{aligned} a(\lambda) &= \iint a(\mu) \psi(\mu, x) \psi^*(\lambda, x) d\mu dx = \\ &= \int a(\mu) d\mu \int \psi(\mu, x) \psi^*(\lambda, x) dx, \end{aligned}$$

т. е.

$$\int \psi(\mu, \xi) \psi^*(\lambda, \xi) d\xi = \delta(\mu - \lambda).$$

Функции $f(x)$ и $a(\lambda)$ дают два равноценных способа описания. Переход от $f(x)$ к $a(\lambda)$ можно представить как результат действия унитарного оператора \hat{U}^+ , ядро которого в интегральной форме имеет вид

$$U^+(\lambda, x) = \psi^*(\lambda, x).$$

Ядро сопряженного оператора \widehat{U} имеет вид

$$U(\lambda, x) = \psi(\lambda, x).$$

Легко проверить, что такой оператор \widehat{U} унитарен. При унитарном преобразовании оператор \widehat{M} преобразуется в $\widehat{U}^+ \widehat{M} \widehat{U}$; такой вид преобразования можно получить и непосредственно:

$$\widehat{M}f(x) = \int a(\lambda) \widehat{M}\psi(x, \lambda) d\lambda,$$

$$\widehat{M}\psi(x, \lambda) = \int M(\lambda, \lambda') \psi(x, \lambda') d\lambda'.$$

Здесь ядро $M(\lambda, \lambda')$ определяется соотношениями

$$M(\lambda, \lambda') = \int \psi^*(x, \lambda) \widehat{M}\psi(x, \lambda') dx,$$

$$Mf(x) = \int a(\lambda) d\lambda \int M(\lambda, \lambda') \psi(x, \lambda') d\lambda' = \int a'(\lambda) \psi(x, \lambda) d\lambda,$$

$$a'(\lambda) = \int M(\lambda', \lambda) a(\lambda') d\lambda'.$$

Итак,

$$M(\lambda, \lambda') = \int U^+(\lambda, x) \widehat{M}U(\lambda', x) dx.$$

Зная вид оператора, действующего на функции от x , мы нашли вид оператора, действующего на функции от λ . Если эрмитов оператор обладает как непрерывным, так и дискретным спектром, то разложение (1.15) принимает вид

$$f(x) = \sum_n a_n \psi_n(x) + \int a(\lambda) \psi(\lambda, x) d\lambda, \quad (1.18)$$

где коэффициенты разложения определяются формулами (1.12), (1.15). Функции дискретного и непрерывного спектра взаимно ортогональны:

$$\int \psi_n^*(x) \psi(\lambda, x) dx = 0.$$

В дальнейшем для упрощения записи мы будем обозначать правую часть (1.18) одним только знаком суммы, подразумевая включение интеграла по непрерывному спектру.

17. Для эрмитовых операторов с дискретным спектром имеют место следующие утверждения.

а) Если операторы \widehat{L} и \widehat{M} имеют общую систему СФ, то они коммутируют. Для любой собственной функции

$$\widehat{L}\widehat{M}\psi_n = \widehat{L}(\mu_n \psi_n) = \lambda_n \mu_n \psi_n = \widehat{M}\widehat{L}\psi_n.$$

Раскладывая произвольную функцию $f(x)$ из L^2 по системе $\psi_n(x)$, получим

$$\widehat{L}\widehat{M}f(x) = \widehat{L}\widehat{M} \sum_n a_n \psi_n(x) = \sum_n a_n \lambda_n \mu_n \psi_n(x) = \widehat{M}\widehat{L}f(x).$$

б) Если операторы \widehat{L} и \widehat{M} коммутируют, то они имеют общую систему собственных функций — матрицы L_{mn} , M_{mn} одновременно приводятся к диагональному виду. Пусть для определения матричных элементов используется система СФ оператора \widehat{L} . Тогда

$$\begin{aligned} L_{mn} &= \lambda_m \delta_{mn}, \\ (\widehat{L}\widehat{M})_{mn} &= (\widehat{M}\widehat{L})_{mn}, \\ \sum_k L_{mk} M_{kn} &= \sum_k L_{kn} M_{mk}, \\ M_{mn} (L_{mm} - L_{nn}) &= 0. \end{aligned}$$

Если СЗ \widehat{L} не вырождены, то $M_{mn} = \mu_n \delta_{mn}$: матрица \widehat{M} диагональна. Если СЗ \widehat{L} вырождены с кратностью g , то могут быть отличны от нуля $g(g-1)$ недиагональных элементов M_{mn} . Линейные комбинации φ_{kg} функций ψ_{kg} , соответствующих вырожденному собственному значению λ_k , могут быть выбраны так, что $M_{mn} = 0$ при $n \neq m$ в системе функций (ψ_n, φ_{kg}) . Так как φ_{kg} также суть СФ \widehat{L} , то \widehat{L} и \widehat{M} будут одновременно приведены к диагональному виду.

18. Если для эрмитова оператора \widehat{N} существуют эрмитовы операторы \widehat{L} и \widehat{M} такие, что

$$[\widehat{M}, \widehat{N}] = 0, \quad [\widehat{L}, \widehat{N}] = 0, \quad [\widehat{M}, \widehat{L}] \neq 0,$$

то собственные значения \widehat{N} вырождены. Из утверждений п. 1.17 следует, что существуют общие системы собственных функций операторов \widehat{M} и \widehat{N} — $\psi(x; \mu, \nu)$ и операторов \widehat{L} и \widehat{N} — $\psi(x; \lambda, \mu)$. Пусть спектр \widehat{N} дискретный:

$$f(x) = \sum_{\nu} a_{\nu} \psi(x, \mu, \nu) = \sum_{\nu} b_{\nu} \psi(x, \lambda, \nu).$$

Вычислим матричный элемент $\langle f | \widehat{M}\widehat{L} | f \rangle$:

$$\begin{aligned} \int \left[\sum_{\nu} a_{\nu} \psi^*(x, \mu, \nu) \right] \widehat{M}\widehat{L} \left[\sum_{\nu'} b_{\nu'} \psi(x, \lambda, \nu') \right] dx &= \\ &= \int \sum_{\nu} \mu_{\nu} a_{\nu} \psi^*(x, \mu, \nu) \sum_{\nu'} \lambda_{\nu'} b_{\nu'} \psi(x, \lambda, \nu') dx. \end{aligned}$$

Если все $C3 \hat{N}$ различны, то в силу (1.11) получаем

$$\langle f | \hat{M} \hat{L} | f \rangle = \sum_v \mu_v a_v \lambda_v b_v.$$

Такой же результат получается и при вычислении матричного элемента $\langle f | \hat{L} \hat{M} | f \rangle$. Следовательно, предположение о том, что все $C3 \hat{N}$ различны, неверно: среди $C3 \hat{N}$ есть вырожденные. Аналогично проводится доказательство и для непрерывного спектра.

19. Определение 13. Следом матрицы L_{mn} называется сумма диагональных элементов

$$\text{Sp } L_{mn} = \sum_n L_{nn}.$$

След произведения двух матриц не зависит от порядка сомножителей:

$$\text{Sp}(\hat{a}\hat{b}) = \sum_n \sum_k a_{nk} b_{kn} = \sum_k \sum_n b_{kn} a_{nk} = \text{Sp}(\hat{b}\hat{a}).$$

След произведения нескольких матриц не меняется при циклической перестановке сомножителей:

$$\text{Sp}(\hat{a}\hat{b}\hat{c}) = \text{Sp}(\hat{b}\hat{c}\hat{a}) = \text{Sp}(\hat{c}\hat{a}\hat{b}).$$

След матрицы не меняется при унитарном преобразовании:

$$\text{Sp } \hat{A} = \text{Sp}(\hat{U}\hat{U}^+ \hat{A}) = \text{Sp}(\hat{U}^+ \hat{A} \hat{U}) = \text{Sp } \hat{a}.$$

Унитарным преобразованием эрмитова матрица \hat{L} может быть приведена к диагональному виду. При этом ее след

$$\text{Sp } \hat{L} = \sum_n \lambda_n$$

равен сумме собственных значений.

Определение 14. Следом интегрального оператора, заданного ядром $L(x, \xi)$, называется величина

$$\text{Sp } \hat{L} = \int L(x, x) dx.$$

Свойства $\text{Sp } \hat{L}$, аналогичные свойствам $\text{Sp } L_{mn}$, легко доказать.

ЗАДАЧИ

1. Доказать тождество Якоби

$$[[\hat{p}, \hat{q}], \hat{r}] + [[\hat{q}, \hat{r}], \hat{p}] + [[\hat{r}, \hat{p}], \hat{q}] = 0.$$

2. Доказать соотношение

$$e^{\hat{L}} \hat{a} e^{-\hat{L}} = \hat{a} + \frac{1}{1!} [\hat{L}, \hat{a}] + \frac{1}{2!} [\hat{L}, [\hat{L}, \hat{a}]] + \dots$$

У к а з а н и е. Рассмотреть оператор $\hat{a}(\eta)$, зависящий от параметра η :

$$\hat{a}(\eta) = e^{\eta\hat{L}}\hat{a}e^{-\eta\hat{L}},$$

и найти дифференциальное уравнение, которому удовлетворяет $\hat{a}(\eta)$.

3. Доказать соотношение:

если $[\hat{b}, \hat{a}] = i\lambda$, то

$$\exp[\eta(\hat{a} + \hat{b})] = \exp(\eta\hat{b}) \cdot \exp(\eta\hat{a}) \cdot \exp\left(-i\frac{\eta^2}{2}\lambda\right).$$

У к а з а н и е. $\exp[\eta(\hat{a} + \hat{b})] = \exp(\eta\hat{b})\hat{L}(\eta)$. Найти уравнение для $\hat{L}(\eta)$.

4. Пусть λ — малый параметр. Написать разложение оператора $(\hat{A} - \lambda\hat{B})^{-1}$ по степеням λ .

5. Пусть $[\hat{c}, \hat{a}] = \lambda\hat{a}$, $\hat{a}|\varphi\rangle = a|\varphi\rangle$. Найти \hat{c} .

6. Найти $[\hat{b}, \hat{c}]$, если $[\hat{c}, \hat{a}] = \lambda\hat{a}$, $[\hat{a}, \hat{b}] = \hat{c}$.

У к а з а н и е. Использовать результат задачи 1.1.

Операторы, определенные соотношениями

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^+] &= \hat{I}, \\ \hat{c}\hat{c}^+ + \hat{c}^+\hat{c} &= \hat{I}, \quad \hat{c}\hat{c} = 0, \end{aligned}$$

играют исключительно важную роль в квантовой механике. Они называются *операторами Бозе* (или *бозе-операторами* \hat{a} , \hat{a}^+) и *операторами Ферми* (или *ферми-операторами* \hat{c} , \hat{c}^+) соответственно. Введенные для них обозначения мы будем использовать постоянно.

7. Пусть

$$\hat{A}_1 = \frac{\hat{a}^+\hat{a}^+ + \hat{a}\hat{a}}{4}, \quad \hat{A}_2 = \frac{\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+}{4}, \quad \hat{A}_3 = i\frac{\hat{a}^+\hat{a}^+ - \hat{a}\hat{a}}{4}.$$

Найти коммутаторы $[\hat{A}_i, \hat{A}_k]$.

8. Пусть функция $f(x)$ разложима в ряд Тейлора. Доказать, что

$$[\hat{a}, f(\hat{a}^+)] = \frac{df(\hat{a}^+)}{d\hat{a}^+}.$$

У к а з а н и е. Доказать для $f(x) = x^n$ по индукции.

9. Доказать, что формула задачи 1.8 правильна и для функций, разложимых в ряд Лорана.

10. Пусть

$$C_1 = \frac{\hat{c} + \hat{c}^+}{2}, \quad C_2 = \frac{\hat{c}^+ - \hat{c}}{2}, \quad C_3 = \frac{\hat{c}^+\hat{c} - \hat{c}\hat{c}^+}{2}.$$

Найти коммутаторы $[\hat{C}_i, \hat{C}_k]$.

11. Найти СФ и СЗ эрмитова оператора в E_2 :

$$\hat{L} = \begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix}, \quad \hat{L} = \hat{L}^+.$$

12. Найти в E_2 матрицы \hat{c} , \hat{c}^+ .

13. Найти СЗ оператора $\hat{n} = \hat{c}^+\hat{c}$.

14. Доказать, что условие

$$\widehat{b}^+ \widehat{b} + \widehat{b} \widehat{b}^+ = -\widehat{I}$$

противоречиво.

15. Доказать, что СЗ оператора $(\widehat{L}^+)^n (\widehat{L})^n$ неотрицательны.

16. Найти СЗ оператора $\widehat{n} = \widehat{a}^+ \widehat{a}$.

Указание. Выразить $(\widehat{a}^+)^n (\widehat{a})^n$ через \widehat{n} и использовать результат задачи 1.15.

17. Показать, что в E_2 матриц \widehat{a}^+ , \widehat{a} нет. Объяснить, сравнив с результатом задачи 1.16.

18. Найти СЗ оператора $\widehat{K} = \widehat{a}^+ \widehat{a} + \widehat{a}^+ \lambda + \widehat{a} \lambda^*$.

19. Найти СЗ оператора $\widehat{L} = \widehat{a}^+ \widehat{b} + \widehat{b}^+ \widehat{a}$, если $[\widehat{b}, \widehat{b}^+] = \widehat{I}$, $[\widehat{a}, \widehat{b}] = 0$, $[\widehat{a}^+, \widehat{b}] = 0$.

20. Найти СЗ оператора $\widehat{M} = i(\widehat{a} \widehat{b}^+ - \widehat{b} \widehat{a}^+)$. Коммутаторы такие же, как и в задаче 1.19.

21. Доказать, что для функций комплексного переменного величина

$$(f, g) = \frac{1}{\pi} \int e^{-|z|^2} f^*(z) g(z) dz$$

обладает свойствами скалярного произведения. (Интеграл берется по всей комплексной плоскости.)

22. Показать, что если скалярное произведение определено как в задаче 1.21, то

$$\widehat{a} = \frac{d}{dz}, \quad \widehat{a}^+ = z.$$

Такое произведение называется представлением Фока–Баргмана.

23. Найти унитарное преобразование, при котором

$$\widehat{a} \rightarrow \widehat{a} + \lambda, \quad \widehat{a}^+ \rightarrow \widehat{a}^+ + \lambda^*.$$

24. Найти общий вид нетривиальных (отличных от \widehat{I}) унитарных эрмитовых матриц $\sigma(\alpha)$ в E_2 .

25. Найти унитарные эрмитовы матрицы σ_i ($i = 1, 2, 3$) в E_2 такие, что

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2\epsilon_{ijk} \sigma_k,$$

в представлении, в котором σ_3 диагональна.

Ответ:

$$\sigma_1 = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}.$$

Эти матрицы применяются в квантовой механике. Они называются *матрицами Паули*. Введенные для них обозначения мы будем использовать постоянно.

26. Найти унитарные матрицы \widehat{A}^{ik} такие, что

$$(\widehat{A}^{ik})^+ \widehat{\sigma}_i (\widehat{A}^{ik}) = \sigma_k.$$

27. Вычислить $E_k(\lambda) = \exp(\lambda \widehat{\sigma}_k)$.

28. Операторы \widehat{D} такие, что $\widehat{D}^2 = \widehat{D}$, называются *проекционными*. Найти проекционные операторы в пространстве E_2 .

29. Доказать, что если \hat{L} имеет дискретный спектр и все λ_n не вырождены, то не существует оператора \hat{M} такого, что

$$[\hat{L}, \hat{M}] = i\hat{I}.$$

30. Доказать, что если \hat{A} и \hat{B} имеют обратные матрицы и

$$\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A} = 0,$$

то \hat{A} и \hat{B} имеют четное число строк и столбцов и

$$\text{Sp } \hat{A} = \text{Sp } \hat{B} = 0.$$

31. Оператор Фурье $\hat{\mathcal{F}}$ определен соотношением

$$\hat{\mathcal{F}} f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{ixy} f(y) dy.$$

Является ли этот оператор эрмитовым? унитарным? Найти спектр оператора Фурье.

ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ

0. При изложении квантовой механики мы будем исходить из следующих основных положений.

A1. Каждой физической величине сопоставляется линейный эрмитов оператор \hat{L} .

A2. Каждому состоянию физической системы сопоставляется нормированная волновая функция ψ .

A3. Физическая величина L может принимать только собственные значения оператора \hat{L} .

A4. Математическое ожидание \bar{L} значений величины L в состоянии ψ определяется диагональным матричным элементом:

$$\bar{L} = \langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle.$$

A5. Матричные элементы операторов декартовых координат \hat{x}_i и декартовых компонент обобщенного импульса \hat{p}_k , вычисленные между волновыми функциями системы f и g , удовлетворяют уравнениям Гамильтона классической механики

$$\frac{d}{dt} \langle f | \hat{p}_i | g \rangle = - \left\langle f \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_i} \right| g \right\rangle,$$

$$\frac{d}{dt} \langle f | \hat{x}_i | g \rangle = \left\langle f \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_i} \right| g \right\rangle,$$

где \hat{H} — оператор, соответствующий классической функции Гамильтона.

A6. Операторы \hat{p}_i и \hat{x}_k удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$\begin{aligned} [\hat{p}_i, \hat{x}_k] &= -i\hbar \delta_{ik}, \\ [\hat{p}_i, \hat{p}_k] &= 0, \quad [\hat{x}_i, \hat{x}_k] = 0, \end{aligned}$$

где \hbar — постоянная Планка:

$$\hbar = 1,0546 \cdot 10^{-27} \text{ эрг}\cdot\text{с.}$$

1. Сопоставление оператора физической величине L , имеющей классический аналог, т. е. являющейся функцией классических переменных $L(x_i, p_k)$, производится заменой классических переменных на операторы \hat{x}_i, \hat{p}_k . Функции предполагаются разложимыми в степенные ряды. Если функция $L(x_i, p_k)$ не содержит в своем разложении членов вида $x_k p_k$, то оператор $\hat{L}(\hat{x}_i, \hat{p}_k)$ будет эрмитовым.

Например, кинетической энергии $T = (\sum_i p_i^2) / 2m$ сопоставляется эрмитов оператор

$$\hat{T} = \sum_{i=1}^3 \frac{\hat{p}_i^2}{2m}.$$

Если в разложении $L(x_i, p_k)$ содержатся члены вида $x_k p_k$, то замена $x_i \rightarrow \hat{x}_i$, $p_i \rightarrow \hat{p}_i$ приводит к неэрмитову оператору \hat{L} , так как произведение эрмитовых \hat{A} и \hat{B} есть эрмитов оператор, только если \hat{A} и \hat{B} коммутируют. В этом случае величине L сопоставляют эрмитову часть оператора \hat{L} . Так, для величины $W(x_i, p_i) = \sum_i p_i x_i$ соответствующий оператор будет иметь вид

$$\hat{W} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 (\hat{p}_i \hat{x}_i + \hat{x}_i \hat{p}_i). \quad (2.1)$$

Другой пример содержится в п. 5.6. Подчеркнем: из правил соответствия следует, что время в квантовой механике есть не наблюдаемая, которой сопоставляется оператор, а параметр.

2. Если волновая функция ψ_n есть собственная функция оператора \hat{L} , то математическое ожидание величины L в этом состоянии равно собственному значению

$$\bar{L} = \langle n | \hat{L} | n \rangle = \lambda_n \langle n | n \rangle = \lambda_n.$$

Аналогично доказывается, что для любого k

$$\overline{L^k} = (\lambda_n)^k,$$

т. е. величина L в состоянии ψ_n с достоверностью принимает значение λ_n . Если φ не есть СФ \hat{L} , то, раскладывая по полной системе СФ \hat{L} , получаем

$$\hat{L} \psi_n = \lambda_n \psi_n, \quad \varphi = \sum_n a_n \psi_n,$$

$$\hat{L} \varphi = \sum_n \lambda_n a_n \psi_n,$$

$$\langle \varphi | \hat{L} | \varphi \rangle = \sum_{m,n} a_m^* a_n \lambda_n \langle m | n \rangle = \sum_m |a_m|^2 \lambda_m,$$

если спектр \hat{L} дискретен. Итак,

$$\bar{L} = \sum_m |a_m|^2 \lambda_m.$$

В соответствии с А4 это означает, что квадраты модулей коэффициентов a_n в разложении волновой функции φ по ψ_n определяют вероятность наблюдения значения λ_n .

Если спектр \hat{L} непрерывен, то

$$\varphi(\tau) = \int a(\lambda) \psi(\tau, \lambda) d\lambda,$$

$$\begin{aligned} \bar{L} &= \int d\tau \int a^*(\lambda) \psi^*(\tau, \lambda) d\lambda \int \mu a(\mu) \psi(\tau, \mu) d\mu = \\ &= \iint a^*(\lambda) a(\mu) \mu d\lambda d\mu \int \psi^*(\tau, \lambda) \psi(\tau, \mu) d\tau, \\ \bar{L} &= \int |a(\lambda)|^2 \lambda d\lambda. \end{aligned}$$

Функция $|a(\lambda)|^2$ есть, согласно А4, плотность вероятности наблюдения значений λ в непрерывном спектре. Диагональный матричный элемент $\langle \varphi | \hat{L} | \varphi \rangle$ мы будем называть также средним значением величины L в состоянии φ .

3. Дифференцирование по оператору в А5 понимается как предельный переход:

$$\frac{\partial F(\hat{L})}{\partial \hat{L}} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{F(\hat{L} + \varepsilon \hat{I}) - F(\hat{L})}{\varepsilon}.$$

Для операторов, определенных в п. 2.1, операции дифференцирования и интегрирования по операторам \hat{x}_i и \hat{p}_k имеют смысл. К любой классической величине $L(x_i, p_k)$ можно, не изменив ее значения, добавить выражение вида

$$p_i x_k - x_k p_i. \quad (2.2)$$

При сопоставлении оператора величине L , такие выражения могут стать и отличными от нуля. Дифференцируя (2.2) по \hat{x}_k , получаем

$$\frac{d}{d\hat{x}_k} (\hat{p}_i \hat{x}_k - \hat{x}_k \hat{p}_i) = \hat{p}_i \hat{I} - \hat{I} \hat{p}_i = 0. \quad (2.3)$$

Поскольку все производные оператора (2.2) по \hat{x}_i и \hat{p}_k обращаются в нуль, то он должен быть константой:

$$p_i x_k - x_k p_i = \text{const.}$$

Величина этой константы и определяется в А6.

4. Найдем явный вид операторов $\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3$, если аргументами волновых функций являются декартовы координаты x_i . Начнем с цепочки равенств:

$$\hat{p}_i \hat{x}_i^2 - \hat{x}_i^2 \hat{p}_i = (\hat{p}_i \hat{x}_i - \hat{x}_i \hat{p}_i) \hat{x}_i + \hat{x}_i (\hat{p}_i \hat{x}_i - \hat{x}_i \hat{p}_i) = -i\hbar \cdot 2\hat{x}_i.$$

Легко показать по индукции, что

$$\hat{p}_i \hat{x}_i^n - \hat{x}_i^n \hat{p}_i = -i\hbar n \hat{x}_i^{n-1}.$$

Поэтому для всех функций, разложимых в степенной ряд,

$$\hat{p}_i \psi(x) - \psi(x) \hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_i}. \quad (2.4)$$

Подействуем оператором \hat{p}_i на $\varphi(x_1, x_2, x_3) = 1$:

$$\hat{p}_i \varphi = f_i(x_1, x_2, x_3).$$

Используя (2.4), получаем

$$\hat{p}_1 \psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + f_1 \psi$$

и аналогичные соотношения для осей x_2 и x_3 . Используя коммутационные соотношения

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_k] = 0,$$

получаем

$$\frac{\partial f_2}{\partial x_1} - \frac{\partial f_1}{\partial x_2} = \frac{\partial f_3}{\partial x_2} - \frac{\partial f_2}{\partial x_3} = \frac{\partial f_1}{\partial x_3} - \frac{\partial f_3}{\partial x_1} = 0.$$

Эти соотношения выполняются, если

$$f_1 = \frac{\partial F}{\partial x_1}, \quad f_2 = \frac{\partial F}{\partial x_2}, \quad f_3 = \frac{\partial F}{\partial x_3},$$

где $F(x_1, x_2, x_3)$ — гладкая функция своих аргументов. Итак,

$$\hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial F}{\partial x_i}.$$

Произвольную функцию F можно исключить с помощью унитарного преобразования

$$\hat{U}^+ = \exp\left(\frac{i}{\hbar} F\right),$$

$$\hat{p}_i = \exp\left(\frac{i}{\hbar} F\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial F}{\partial x_i}\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar} F\right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}.$$

Итак, найден явный вид операторов \hat{p}_i для функций, аргументами которых являются декартовы координаты x_i :

$$\hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}. \quad (2.5)$$

Компоненты оператора импульса образуют вектор импульса

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

5. Произвольную волновую функцию $\psi(x)$ из L^2 , зависящую от координаты, можно представить в виде

$$\psi(x) = \int \delta(x - \xi) \psi(\xi) d\xi$$

и рассматривать это выражение как разложение $\psi(x)$ по СФ оператора координаты

$$\hat{x} \delta(x - \xi) = \xi \delta(x - \xi).$$

Следовательно, согласно п. 2.2, величина $|\psi(x)|^2$ есть плотность вероятности координаты в состоянии $\psi(x)$. Отсюда ясен и смысл нормирования волновой функции:

$$\|\psi\|^2 = \int |\psi(x)|^2 dx = 1.$$

Система, описываемая такой функцией $\psi(x)$, с достоверностью находится в какой-то области пространства.

Оператор компоненты импульса \hat{p}_x в x -представлении имеет вид

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}.$$

Собственные функции компоненты импульса определяются из уравнения

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_i} = p_i \psi, \quad (2.6)$$

$$\psi(x_i) = A \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_i x_i\right).$$

Найдем нормировочный коэффициент A . Известные выражения для прямого и обратного преобразований Фурье имеют вид

$$f(k) = \int g(x) e^{-ikx} dx, \quad g(x) = \frac{1}{2\pi} \int f(k) e^{ikx} dk.$$

Сравнивая эти выражения с (1.15), (1.16), получаем

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

Из формулы (1.15) следует, что собственные функции оператора импульса образуют полную (для функций из L^2) систему

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int a(p) \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) dp, \\ a(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi(x) \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) dx. \end{aligned}$$

Эти формулы устанавливают связь между x - и p -представлениями.

6. Рассмотрим p -представление. Явный вид операторов \hat{p}_i и \hat{x}_k может быть, разумеется, найден из коммутационных соотношений, как и в п. 2.4. Но мы воспользуемся общими соотношениями, полученными в п. 1.16. Ядро оператора \hat{x} в p -представлении

$$\begin{aligned} x(p, \beta) &= \hat{U}^+ x \hat{U} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) x \exp\left(\frac{i\beta x}{\hbar}\right) dx = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial \beta} \exp\left(\frac{i\beta x}{\hbar}\right)\right) dx. \end{aligned}$$

Рассмотрим действие \hat{x} на функцию $a(p)$ из L^2 :

$$\begin{aligned} \int x(p, \beta) a(\beta) d\beta &= -\frac{i}{2\pi} \iint \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \exp\left(\frac{i\beta x}{\hbar}\right)\right) a(\beta) dx d\beta = \\ &= \frac{i}{2\pi} \iint \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \frac{\partial a}{\partial \beta} \exp\left(\frac{i\beta x}{\hbar}\right) dx d\beta = i\hbar \frac{\partial a(p)}{\partial p}. \end{aligned}$$

Оператор импульса в p -представлении задается ядром:

$$\begin{aligned} p(p, \beta) &= \hat{U}^+ p \hat{U} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \exp\left(\frac{i\beta x}{\hbar}\right) dx = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int \exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right) \beta \exp\left(\frac{i\beta x}{\hbar}\right) dx = \beta \delta(p - \beta), \\ \hat{p} a(p) &= p a(p). \end{aligned}$$

В заключение отметим, что операторы \hat{x} и \hat{p} эрмитовы на функциях $f(x)$ из L^2 , но не эрмитовы на своих собственных функциях. В самом деле, пусть $\hat{p} a(p) = p_0 a(p)$ и $\hat{x} = \hat{x}^+$, $\hat{p} = \hat{p}^+$. Тогда

$$\begin{aligned} \langle a | \hat{p} \hat{x} | a \rangle - \langle a | \hat{x} \hat{p} | a \rangle &= -i\hbar \langle a | a \rangle, \\ p_0 \{ \langle a | \hat{x} | a \rangle - \langle a | \hat{x} | a \rangle \} &= -i\hbar \langle a | a \rangle. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Левая часть последнего выражения равна нулю, правая бесконечна. Этот результат является следствием одних только коммутационных соотношений.

7. Уравнение движения для матричных элементов А5 допускает различные интерпретации. В выражении

$$\frac{d}{dt} \langle f | \hat{L} | g \rangle$$

мы можем считать зависимость от времени отнесенной полностью к волновым функциям или полностью к операторам.

а) Рассмотрим описание с помощью операторов, зависящих от времени.

Из А5 следует:

$$\dot{\hat{p}}_i = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_i}, \quad \dot{\hat{x}}_i = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_i}.$$

Используя формулы (2.4)

$$\hat{p}_i f - f \hat{p}_i = -i\hbar \frac{\partial f}{\partial x_i},$$

получаем уравнение движения для компоненты оператора импульса

$$\dot{\hat{p}}_i = -\frac{i}{\hbar} [\hat{p}_i, \hat{H}] \quad (2.8)$$

и аналогичное уравнение для оператора координаты

$$\dot{\hat{x}}_i = -\frac{i}{\hbar} [\hat{x}_i, \hat{H}]. \quad (2.9)$$

Такой способ описания называется *представлением Гайзенберга*, а уравнения (2.8)–(2.9) — *уравнениями Гайзенберга*.

б) Рассмотрим описание движения с помощью зависящих от времени волновых функций. Используя формулу (2.8)*, представим уравнение для матричных элементов в виде

$$\frac{d}{dt} \langle f | \hat{p}_i | g \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle f | [\hat{p}_i, \hat{H}] | g \rangle.$$

Считая операторы \hat{p}_i и \hat{H} не зависящими от времени и учитывая их эрмитовость, получим

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}, \hat{p}_i g \right) + \left(\hat{p}_i f, \frac{\partial g}{\partial t} \right) &= -\frac{i}{\hbar} \left(f, \hat{p}_i \hat{H} g \right) + \frac{i}{\hbar} \left(f, \hat{H} \hat{p}_i g \right), \\ \left(\frac{\partial f}{\partial t}, \hat{p}_i g \right) + \left(\hat{p}_i f, \frac{\partial g}{\partial t} \right) &= -\frac{i}{\hbar} \left(\hat{p}_i f, \hat{H} g \right) + \frac{i}{\hbar} \left(\hat{H} f, \hat{p}_i g \right), \\ \left(\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \hat{H} f, \hat{p}_i g \right) + \left(\hat{p}_i f, \frac{\partial g}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} \hat{H} g \right) &= 0. \end{aligned}$$

Последнее соотношение будет выполнено при произвольных в начальный момент времени волновых функциях $f(x)$ и $g(x)$, если они удовлетворяют уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi. \quad (2.10)$$

Это уравнение называется *уравнением Шредингера*, а способ описания системы с помощью операторов, не зависящих от времени, — *представлением Шредингера*. В дальнейшем мы будем использовать также сокращения ВФ вместо «волновая функция» и УШ вместо «уравнение Шредингера».

В обоих представлениях времени эволюция системы характеризуется гамильтонианом \hat{H} — оператором, полученным из функции Гамильтона классической механики согласно правилам, изложенным в п. 2.1.

Так, гамильтониан частицы во внешнем поле с потенциалом $U(x_1, x_2, x_3)$ есть

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3).$$

В координатном представлении \hat{H} имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x_1, x_2, x_3), \quad (2.11)$$

где Δ — оператор Лапласа.

8. Уравнения А5 справедливы как в представлении Гайзенберга, так и в представлении Шредингера. Поэтому математические ожидания значений наблюдаемых в этих представлениях совпадают. Должно существовать унитарное преобразование, переводящее одно представление в другое. Такое преобразование осуществляется оператором

$$\hat{S} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right). \quad (2.12)$$

Обозначим волновую функцию и оператор в представлении Гайзенберга f и \hat{L} , а в представлении Шредингера — ψ и $\hat{\Lambda}$:

$$\psi = \hat{S}^+ f, \quad (2.13)$$

$$\hat{\Lambda} = \hat{S}^+ \hat{L} \hat{S}. \quad (2.14)$$

Так как f по определению от времени не зависит, то дифференцируя (2.13), получим

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial(\hat{S}^+)}{\partial t} f = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{S}^+ f = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\psi,$$

что совпадает с уравнением Шредингера. Дифференцируя по времени равенство

$$\hat{L} = \hat{S}\hat{\Lambda}\hat{S}^+,$$

получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} &= \frac{\partial \hat{S}}{\partial t} \hat{\Lambda} \hat{S}^+ + \hat{S} \hat{\Lambda} \frac{\partial \hat{S}^+}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{S} \hat{\Lambda} \hat{S}^+ - \frac{i}{\hbar} \hat{S} \hat{\Lambda} \hat{S}^+ \hat{H}, \\ \frac{\partial \hat{L}}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{L}], \end{aligned} \quad (2.15)$$

что совпадает с уравнениями Гайзенберга. Уравнение (2.15) можно записать в виде

$$\frac{\partial \hat{L}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \hat{S} [\hat{H}, \hat{\Lambda}] \hat{S}^+.$$

Величина \hat{L} называется *интегралом движения*, если

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle = 0.$$

Интеграл движения удовлетворяет двум эквивалентным условиям (соответствующий оператор — и в шредингеровском, и в гайзенберговском представлениях — коммутирует с гамильтонианом):

$$[\hat{H}, \hat{L}] = [\hat{H}, \hat{\Lambda}] = 0.$$

9. Если функция Гамильтона системы не зависит от времени, то состояния, описываемые собственными функциями гамильтониана \hat{H} , называются *стационарными состояниями*, а множество собственных значений \hat{H} — *энергетическим спектром*. Для стационарных состояний уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n}{\partial t} = E_n \psi_n = \hat{H} \psi_n. \quad (2.16)$$

Интегрирование по времени непосредственно дает временную зависимость волновых функций стационарных состояний

$$\psi_n(t, \mathbf{x}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \varphi_n(\mathbf{x}),$$

где $\varphi_n(\mathbf{x})$ — функция одних только координат. Распределение вероятности зависит от квадрата модуля волновой функции:

$$\rho(\mathbf{x}) = |\psi_n(t, \mathbf{x})|^2 = |\varphi_n(\mathbf{x})|^2 \quad (2.17)$$

и остается во времени постоянным. В стационарных состояниях дискретного спектра среднее значение коммутатора $[\hat{H}, \hat{A}]$, где \hat{A} — любой оператор, обращается в нуль:

$$\langle n | \hat{H} \hat{A} - \hat{A} \hat{H} | n \rangle = E_n \langle n | \hat{A} | n \rangle - E_n \langle n | \hat{A} | n \rangle = 0.$$

Пусть \hat{H} — гамильтониан частицы в поле $U(\mathbf{r})$, а \hat{A} — оператор \hat{W} , определенный формулой (2.1). Тогда

$$\langle \psi | [\hat{H}, \hat{A}] | \psi \rangle = 0 = -i\hbar (2\langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle - \langle \psi | \mathbf{r} \cdot \nabla U | \psi \rangle).$$

Первый член в скобках есть удвоенное значение средней кинетической энергии \bar{T} . Если $U(r) = U_0 r^n$, то второй член в скобке есть просто $n\bar{U}$. Таким образом,

$$\bar{T} = \frac{n}{2} \bar{U}. \quad (2.18)$$

Соотношение (2.18) называется *теоремой вириала*.

Приведем еще одно соотношение для стационарных состояний частицы с гамильтонианом \hat{H} (2.11). Из (2.9) следует, что

$$[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m} \hat{\mathbf{p}}.$$

Вычисляя матричные элементы обеих сторон этого равенства с помощью ВФ стационарных состояний, получим

$$\frac{i\hbar}{m} \langle n | \hat{\mathbf{p}} | k \rangle = (E_k - E_n) \langle n | \hat{\mathbf{r}} | k \rangle. \quad (2.19)$$

10. Энергетический спектр может быть как дискретным, так и непрерывным. ВФ дискретного спектра в координатном представлении могут быть нормированы условием

$$\int |\psi_n(\mathbf{x})|^2 d\mathbf{x} = 1. \quad (2.20)$$

Это означает, что плотность вероятности убывает при больших x достаточно быстро, чтобы интеграл в (2.20) сходился. Вероятность нахождения частицы вне некоторого конечного объема может быть сделана сколь угодно малой — частица совершает финитное движение. Поэтому состояния дискретного энергетического спектра называются *связанными*.

Для ВФ непрерывного спектра $\psi_\lambda(x)$ дать непосредственную вероятностную интерпретацию нельзя, так как интеграл от плотности вероятности по всему пространству расходится. Физический смысл имеют только состояния, соответствующие квадратично интегрируемым ВФ φ . Если такая ВФ представима в виде линейной комбинации ВФ непрерывного спектра

$$\varphi = \int a(\lambda) \psi_\lambda(x) dx,$$

то мы будем говорить, что она соответствует инфинитному движению. В ряде случаев функция $a(\lambda)$ заметно отлична от нуля только в окрестности точки $\lambda = \lambda_0$; свойства таких ВФ во многом близки к свойствам функций $\psi_\lambda(x)$.

Рассмотрим изменение со временем вероятности нахождения в объеме Ω частицы с гамильтонианом \hat{H} (2.11):

$$W = \int_{\Omega} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d\mathbf{x}, \quad \frac{dW}{dt} = \int_{\Omega} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} + \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) d\mathbf{x}.$$

Используя уравнение Шредингера, получим

$$\frac{dW}{dt} = \frac{i}{\hbar} \int_{\Omega} (\psi \hat{H}^+ \psi^* - \psi^* \hat{H} \psi) d\mathbf{x}. \quad (2.21)$$

В правой части (2.21) отличны от нуля только члены с производными. Учитывая соотношение

$$f \Delta g - g \Delta f = \text{div} (f \text{grad} g - g \text{grad} f),$$

получим уравнение

$$\frac{dW}{dt} = - \int_{\Omega} \operatorname{div} \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) d\mathbf{x}.$$

Преобразуя объемный интеграл в поверхностный по теореме Гаусса, получаем

$$\frac{dW}{dt} = - \oint_{\Sigma(\Omega)} \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) dS. \quad (2.22)$$

Величина

$$\mathbf{j}(\psi) = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$$

называется *плотностью потока* вероятности. Уравнение (2.22) имеет смысл уравнения непрерывности. В дифференциальной форме оно имеет вид

$$\frac{d\rho}{dt} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0.$$

Уравнение непрерывности означает, что вероятность нахождения частицы в объеме Ω может измениться только за счет перехода частицы через границу объема: УШ с гамильтонианом (2.11) не описывает источников (и стоков) частиц. Если ВФ имеет вид $\psi(x) = AR(x)$, где $R(x)$ — действительная функция, а A — комплексная константа, то $\mathbf{j}(\psi) = 0$. Для собственных функций импульса

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}\mathbf{x}\right)$$

плотность потока вероятности

$$\mathbf{j}(\psi) = \frac{\mathbf{p}}{m(2\pi\hbar)^3}$$

пропорциональна импульсу и не зависит от координаты.

11. Если гамильтониан \hat{H} инвариантен по отношению к переносу на любой вектор \mathbf{a} :

$$\hat{H}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \hat{H}(\mathbf{r}), \quad (2.23)$$

то должен существовать унитарный оператор $\hat{T}(\mathbf{a})$ такой, что

$$\hat{T}(\mathbf{a})\hat{H}(\mathbf{r})\hat{T}^+(\mathbf{a}) = \hat{H}(\mathbf{r} + \mathbf{a}).$$

Поскольку последовательные переносы коммутируют:

$$\hat{T}(\mathbf{a})\hat{T}(\mathbf{b}) = \hat{T}(\mathbf{b})\hat{T}(\mathbf{a}) = \hat{T}(\mathbf{a} + \mathbf{b}),$$

то оператор \hat{T} должен иметь вид

$$\hat{T} = \exp(i\hat{\mathbf{K}}\mathbf{a}),$$

где \hat{K} — некоторый эрмитов оператор. Рассмотрим бесконечно малый перенос

$$\begin{aligned} \hat{T}(\delta\mathbf{a})\hat{H}\hat{T}^+(\delta\mathbf{a}) &\approx (\hat{I} + i\hat{K}\delta\mathbf{a})\hat{H}(\hat{I} - i\hat{K}\delta\mathbf{a}), \\ \hat{H}(\mathbf{r}) + i[\hat{K}, \hat{H}]\delta\mathbf{a} &= \hat{H}(\mathbf{r}) + (\nabla\hat{H})\delta\mathbf{a}. \end{aligned}$$

Из сравнения с (2.4) находим явный вид оператора \hat{K} :

$$\hat{K} = \hbar^{-1}\hat{\mathbf{p}}.$$

Из условия (2.23) следует, что $[\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] = 0$, т. е. импульс есть интеграл движения. Состояние системы описывается СФ импульса

$$\psi(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{r}\right).$$

При унитарном преобразовании \hat{T}

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{a}\right)\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}).$$

Оператор пространственного переноса $\hat{T}^+ = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\mathbf{a}\right)$ аналогичен оператору «временного переноса» $\hat{S} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)$, введенному в п. 2.8.

12. Гамильтониан может быть инвариантен по отношению к дискретному набору переносов. Например, в кристаллической решетке

$$\hat{H}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \hat{H}(\mathbf{r}), \quad (2.24)$$

если $\mathbf{a} = \sum_i \mathbf{a}_i n_i$, где n_i — целые числа, а \mathbf{a}_i — базисные векторы решетки. Для функций стационарных состояний

$$\begin{aligned} \hat{H}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) &= E\psi(\mathbf{r}), \\ \hat{H}(\mathbf{r} + \mathbf{a})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) &= E\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \hat{H}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Поэтому $\psi(\mathbf{r})$ и $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$ суть СФ $\hat{H}(\mathbf{r})$, соответствующие одному и тому же значению энергии. Можно представить связь между этими решениями в виде

$$\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \hat{c}(\mathbf{a})\psi(\mathbf{r}),$$

где $\hat{c}(\mathbf{a})$ — матрица с числом строк и столбцов, равным g — кратности вырождения уровня E . Матрицы $\hat{c}(\mathbf{a})$ и $\hat{c}(\mathbf{b})$, очевидно, коммутируют и могут быть одновременно приведены к диагональному виду. Для них имеет место уравнение

$$c_{ii}(\mathbf{a})c_{ii}(\mathbf{b}) = c_{ii}(\mathbf{a} + \mathbf{b}) \quad (i = 1, 2, \dots, g).$$

Это уравнение имеет решение вида

$$c_{ii}(\mathbf{a}) = e^{i\mathbf{k}_i\mathbf{a}}.$$

Таким образом, решения уравнения (2.25) имеют вид

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (2.26)$$

где \mathbf{k} — произвольный вещественный вектор, а функция $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ — периодическая с периодом \mathbf{a} решетка

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}).$$

В случае, рассмотренном в п. 2.11, функция $u_{\mathbf{k}}$ должна быть константой — единственной функцией, периодической с любым \mathbf{a} . Утверждение о возможности представить СФ гамильтониана, удовлетворяющего соотношению (2.24), в виде (2.26) называется *теоремой Блоха*.

По аналогии с оператором переноса, рассмотренным в п. 2.11, вектор $\mathbf{K} = \hbar\mathbf{k}$ называется *квазиимпульсом*. Заметим, что вектор \mathbf{k} определен неоднозначно. К нему можно добавить любой вектор \mathbf{g} такой, что

$$\mathbf{g}\mathbf{a} = 2\pi n,$$

где n — целое число. Множество таких векторов можно представить в виде

$$\mathbf{g} = \sum_{i=1}^3 \mathbf{b}_i m_i,$$

где m_i — целые числа, а векторы

$$\mathbf{b}_i = 2\pi \frac{[\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k]}{\mathbf{a}_i [\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k]} \quad (i \neq j \neq k)$$

суть базисные векторы обратной решетки.

ЗАДАЧИ

1. Доказать тождества

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{p}} \times [\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}]] &= i\hbar\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{p}}^2 - \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{p}}, \\ [\hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}]^2 &= \hat{\mathbf{x}}^2\hat{\mathbf{p}}^2 - (\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{p}} - i\hbar)^2. \end{aligned}$$

2. Показать, что если $\hat{L} = f(\hat{\mathbf{x}})g(\hat{\mathbf{p}})$, то

$$\text{Sp } \hat{L} = \frac{1}{2\pi\hbar} \iint f(x)g(p) dx dp.$$

3. Найти вид гайзенберговского оператора \hat{x} в координатном представлении для свободной частицы ($U(\mathbf{r}) = 0$) и для гармонического осциллятора ($U(x) = Ax^2$).

4. Найти унитарный оператор, осуществляющий преобразование Галилея

$$p_i \rightarrow p_i + mv_i, \quad x_i \rightarrow x_i + v_i t.$$

ОДНОМЕРНОЕ ДВИЖЕНИЕ

0. В квантовой механике движение частицы во внешнем поле с потенциалом $U(\mathbf{r})$ может быть описано уравнением Шредингера, которое в координатном представлении сводится к линейному уравнению в частных производных для функции четырех переменных $\Psi(\mathbf{r}, t)$:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(\mathbf{r})\Psi. \quad (3.1)$$

Решение уравнения (3.1) существенно упрощается, если возможно разделение переменных. Например, если потенциал $U(\mathbf{r})$ имеет вид

$$U(\mathbf{r}) = U_1(x_1) + U_2(x_2) + U_3(x_3), \quad (3.2)$$

то переменные в уравнении Шредингера можно разделить в декартовых координатах. Рассмотрим стационарное решение

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_1(x_1) \psi_2(x_2) \psi_3(x_3) \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right). \quad (3.3)$$

Если функции ψ_i при $i = 1, 2, 3$ удовлетворяют уравнениям

$$\hat{H}_i \psi_i = E_i \psi_i, \quad (3.4)$$

где

$$\hat{H}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + U_i(x_i),$$

то выражение (3.3) описывает стационарное состояние с энергией $E = E_1 + E_2 + E_3$. Мы будем называть (3.4) *одномерным уравнением Шредингера*, а параметр разделения E_i — энергией, опуская индексы у E_i , \hat{H}_i и ψ_i . Вид потенциала (3.2) не является сколько-нибудь общим (хотя можно указать важные задачи, в которых потенциал $U(\mathbf{r})$ можно считать зависящим только от одной декартовой координаты). С другой стороны, рассмотрение одномерного уравнения Шредингера позволяет на простых примерах изучить качественные закономерности в свойствах спектров и ВФ стационарных состояний, многие из которых сохраняют силу и в других случаях — например, если уравнение (3.1) допускает разделение переменных в криволинейных координатах (важнейший пример — задача о движении частицы в центральном поле, рассмотренная в гл. 5).

1. Начнем с рассмотрения состояний дискретного спектра уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + U(x) \psi = E \psi. \quad (3.5)$$

Пусть потенциал $U(x)$ имеет единственный минимум, а при $x \rightarrow \pm\infty$ стремится к пределам U_- и U_+ соответственно (рис. 1). В классической механике локальное свойство потенциала — наличие минимума — достаточно для существования финитных движений.

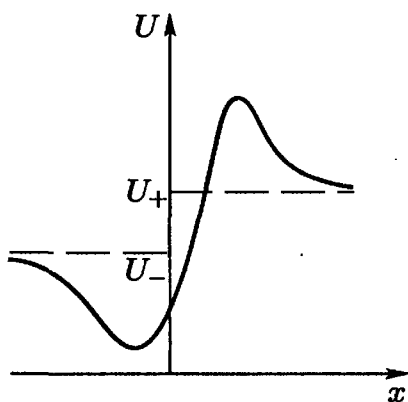


Рис. 1

В квантовой механике характер движения зависит от глобальных свойств потенциала. Необходимым (но недостаточным) условием существования дискретного спектра является неравенство

$$\min U(x) < \min (U_-, U_+).$$

Потенциалы, удовлетворяющие этим условиям, называются *потенциальными ямами* (или кратко — *ямами*).

Дискретный энергетический спектр частицы в потенциальной яме локализован в области энергий

$$\min U(x) < E \leq \min (U_-, U_+). \quad (3.6)$$

Если хотя бы один из пределов U_-, U_+ конечен, то величину $\min (U_-, U_+)$ принимают за начало отсчета энергии ($U(x) = 0$), а величину $|E_n|$ называют *энергией связи* n -го состояния. В противном случае за начало отсчета энергии принимают $\min U(x)$.

2. Отыскание дискретного спектра сводится к отысканию решений одномерного УШ, удовлетворяющих условию нормировки (см. п. 2.0)

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (3.7)$$

Отсюда следует, что в состояниях дискретного спектра ВФ удовлетворяет граничным условиям: при $|x| \rightarrow \infty$ $\psi(x) \rightarrow 0$ и $\psi'(x) \rightarrow 0$.

Если потенциал $U(x)$ ограничен снизу, то и дискретный спектр ограничен снизу, $E > \min U(x)$. Допустим противное: $\psi(x)$ есть решение УШ, принадлежащее L^2 при $E < \min U(x)$; тогда из равенства

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = [E - U(x)]\psi$$

следует, что знак ψ'' всюду совпадает со знаком ψ . Пусть $\psi(-\infty) = +0$. Тогда ψ'' и ψ' будут всюду положительны: $\psi(x)$ будет монотонно возрастающей функцией, что несовместимо с (3.7). Позже (в гл. 5) мы увидим, что требование ограниченности $U(x)$ снизу есть достаточное, но не необходимое условие ограниченности снизу дискретного спектра.

Состояния дискретного спектра нумеруются в порядке возрастания энергии. Состоянию с наименьшей энергией — *основному*

состоянию — обычно присваивается номер 0 (энергия основного состояния есть E_0). Все прочие состояния (принадлежащие как дискретному, так и непрерывному спектрам) называются *возбужденными состояниями*.

Состояния дискретного спектра в одномерном случае не вырождены. Допустим противное: $\psi(x)$ и $\varphi(x)$ суть линейно независимые решения, соответствующие одному значению E_n . Вычитая

$$\varphi \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' + [E_n - U(x)] \psi \right\} = 0$$

из

$$\psi \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \varphi'' + [E_n - U(x)] \varphi \right\} = 0,$$

получим

$$\psi \varphi'' - \varphi \psi'' = 0 = \frac{d}{dx} (\psi \varphi' - \varphi \psi').$$

Интегрируя это выражение от $-\infty$ до x , получим

$$\psi \varphi' - \varphi \psi' = 0 = \psi \varphi \left(\frac{\varphi'}{\varphi} - \frac{\psi'}{\psi} \right).$$

Итак,

$$(\ln \psi)' - (\ln \varphi)' = 0, \quad \psi = \text{const} \cdot \varphi,$$

что противоречит предположению о линейной независимости.

Для состояний дискретного спектра справедлива *осцилляционная теорема*: ВФ $\psi_n(x)$, описывающая состояние $|n\rangle$, имеет при конечных значениях x в точности n нулей.

Рассмотрим асимптотическое поведение решений УШ (3.5) вдали от потенциальной ямы. Если потенциал $U(x)$ с ростом $|x|$ стремится к нулю достаточно быстро, то в уравнении (3.5) можно пренебречь членом, содержащим $U(x)$. В этом случае УШ превращается в линейное дифференциальное уравнение с постоянными коэффициентами, которое решается элементарно: ВФ состояний дискретного спектра вдали от начала координат убывают по экспоненциальному закону:

$$\psi_n(x) \sim \exp(-\varkappa |x|), \quad (3.8)$$

а показатель экспоненты \varkappa зависит от энергии состояния E_n ,

$$\varkappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} |E_n|}, \quad (3.9)$$

но не от формы потенциала.

В примерах встретятся потенциалы различной степени гладкости. Из УШ следует, что $U(x)$ и $\psi''(x)$ — одинаково гладкие функции. В частности, если $U(x)$ имеет конечный разрыв, то в точке разрыва $\psi(x)$ и $\psi'(x)$ непрерывны. Если в некоторой области пространства $U(x) \rightarrow \infty$, то всюду в ней и на ее границе $\psi(x) = 0$.

3. Исследуем свойства подобия для решений УШ. Рассмотрим потенциальную яму конечной глубины с пределами $U_+ = U_- = 0$ (рис. 2). Ее можно описать выражением вида

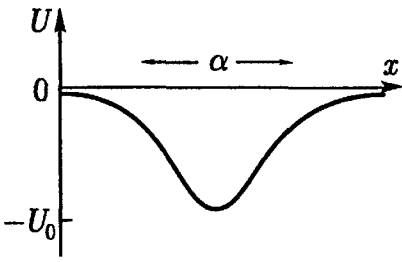


Рис. 2

$$U(x) = -U_0 f\left(\frac{x}{a}\right),$$

где $f(0) = 1$ и $f(z) > 0$ при всех z . Величина U_0 называется *глубиной* потенциальной ямы, а a — (характерной) *шириной* ямы (рис. 2). Соответствующее одномерное УШ для n -го стационарного состояния

дискретного спектра может быть записано в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} - U_0 f\left(\frac{x}{a}\right) \psi = E_n \psi. \quad (3.10)$$

Будем задавать координату безразмерной переменной $y = x/a$. Заменяя переменные в уравнении (3.10) и разделив его на U_0 , получим для $\psi(y)$ уравнение вида

$$-\frac{1}{B} \frac{d^2 \psi}{dy^2} - f(y) \psi = -\varepsilon_n \psi. \quad (3.11)$$

Величина $\varepsilon_n = -E_n/U_0$ обозначает отношение энергии связи n -го стационарного состояния дискретного спектра к глубине ямы — относительную энергию связи. Безразмерный параметр

$$B = \frac{2mU_0 a^2}{\hbar^2} \quad (3.12)$$

мы будем называть *борновским параметром*. Его можно рассматривать как количественную характеристику силы потенциала: при $B \ll 1$ потенциал является слабым, а при $B \gg 1$ — сильным. Непосредственно из уравнения (3.11) видно, что при неизменном виде функции $f(y)$, описывающей форму потенциала, положение энергетических уровней, отнесенных к глубине ямы, зависит только от величины борновского параметра: $\varepsilon_n = \varepsilon(n, B)$.

Рассмотрим стационарное УШ с гамильтонианом $\hat{H}(\lambda)$, зависящим от параметра λ ,

$$\hat{H}(\lambda) \psi_n(\lambda) = E_n(\lambda) \psi_n(\lambda).$$

Дифференцируя это уравнение по λ , получим

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \psi_n + \hat{H} \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda} = \frac{dE_n}{d\lambda} \psi_n + E_n \frac{\partial \psi_n}{\partial \lambda}.$$

Домножая это выражение слева на ψ_n , интегрируя по x и учитывая эрмитовость гамильтониана $\hat{H}(\lambda)$, приходим к соотношению

$$\frac{dE_n}{d\lambda} = \langle n | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | n \rangle, \quad (3.13)$$

которое составляет утверждение *теоремы Хеллмана–Фейнмана*. Равенство (3.13) показывает, что скорость изменения собственных значений при изменении параметра пропорциональна среднему значению частной производной гамильтониана по этому параметру. Отметим, что при выводе (3.13) от оператора $\hat{H}(\lambda)$ требовалась только эрмитовость, поэтому результат может быть обобщен для собственных значений любых зависящих от параметра эрмитовых операторов.

Уравнение (3.11) можно рассматривать как уравнение для собственных значений гамильтониана, зависящего от борновского параметра,

$$\hat{H}(B) = -\frac{1}{B} \frac{d^2}{dy^2} - f(y).$$

Из теоремы Хеллмана–Фейнмана получаем

$$\frac{d\varepsilon_n}{dB} = \frac{1}{B^2} \langle n | -\frac{d^2}{dy^2} | n \rangle = \frac{1}{B^2} \langle n | \left(-i \frac{d}{dy}\right)^2 | n \rangle.$$

Величина в обкладках в последнем выражении представляет собой квадрат эрмитова оператора; его среднее значение для всех нормируемых функций $|n\rangle$ положительно (ср. задачу 1.15). Таким образом, для любой потенциальной ямы

$$\frac{d\varepsilon_n}{dB} > 0 \quad (3.14)$$

относительные энергии связи состояний дискретного спектра при возрастании борновского параметра монотонно возрастают.

4. Рассмотрим задачу о слабой потенциальной яме ($B \ll 1$) в наиболее важном случае $U_- = U_+ = 0$. Пусть, например, яма заданной формы углубляется и сужается так, что $U_0 \rightarrow \infty$, $a \rightarrow -0$, а ее емкость

$$\int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx = -U_0 a \int_{-\infty}^{\infty} f(y) dy = -q < 0 \quad (3.15)$$

остается постоянной. Это условие описывает (слабый) предельный переход потенциала в δ -функцию Дирака: $\lim U(x) = -q\delta(x)$. Так мы приходим к рассмотрению УШ с δ -потенциалом (δ -ямой)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi'' - q\delta(x) \psi = E\psi. \quad (3.16)$$

При $x \neq 0$ и $E < 0$ у этого уравнения существуют убывающие при $|x| \rightarrow \infty$ решения, совпадающие с асимптотиками (3.8):

$$\psi(x) = A \exp(-\kappa|x|), \quad (3.17)$$

где A — нормировочный коэффициент (рис. 3). В точке $x = 0$ вторая производная функции (3.17) имеет интегрируемую сингулярность.

Следовательно, ψ' испытывает конечный скачок, а ψ непрерывна. Интегрируя уравнение (3.16) в окрестности точки $x = 0$, получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(+0) - \psi'(-0)] = q\psi(0). \quad (3.18)$$

Подставляя в это выражение ВФ (3.17), находим

$$\varkappa = \frac{mq}{\hbar^2}, \quad E = -\frac{mq^2}{2\hbar^2}.$$

Правильной нормировке ВФ соответствует значение $A = \sqrt{\varkappa}$. Учитывая, что согласно (3.15) $q = KU_0a$, где

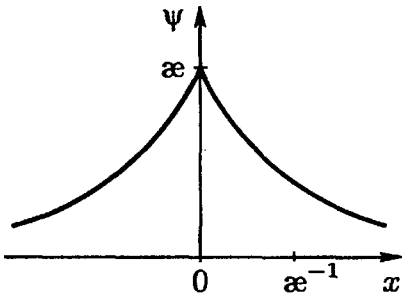


Рис. 3

$$K = \int_{-\infty}^{\infty} f(y)dy$$

есть числовой множитель порядка единицы, для относительной энергии связи получаем выражение

$$\varepsilon = \frac{K^2}{4} B,$$

где B — борновский параметр (3.12). При заданном выше предельном переходе борновский параметр $B \sim qa \rightarrow 0$. Итак, в одномерной потенциальной яме, для которой интеграл (3.15) конечен и отрицателен, при малых значениях борновского параметра существует состояние дискретного спектра с малой в сравнении с глубиной ямы энергией связи $\varepsilon \propto B$.

По сказанному в п. 3.4 пределу $B \rightarrow 0$ соответствует также переход $a = \text{const}$, $U_0 \rightarrow 0$. Потенциальную яму $U(x)$ в этом случае можно заменить δ -ямой, так как ее ширина a оказывается малой в сравнении с длиной локализации ВФ:

$$\varkappa^{-1} \sim \frac{a}{\sqrt{B}} \gg a.$$

Уравнение (3.18) можно рассматривать как специфическую форму описания взаимодействия — через наложение условий на локальные характеристики волновой функции. Модели δ -потенциалов являются одними из простейших в квантовой теории и часто используются как элементы при построении более сложных моделей (см. п. 3.3 и задачи 3.4 и 3.5).

5. Рассмотрим теперь случай сильной потенциальной ямы, $B \gg 1$. С ростом B значения ε_n возрастают, оставаясь ограниченными сверху: $\varepsilon_n < 1$. Поэтому при $B \gg 1$ естественно ожидать существования состояний дискретного спектра с энергиями, близкими к глубине

ямы, $E_n \approx -U_0$. В классической механике финитное движение вблизи минимума потенциала называется малыми колебаниями. Простая модель для их описания получается, если разложить потенциал $U(x)$ вблизи минимума в ряд по степеням x и отбросить в разложении все члены выше квадратичного (рис. 4). Взяв точку минимума в качестве начала координат, получим

$$U(x) \approx -U_0 + \frac{f''(0)}{2} U_0 \frac{x^2}{a^2}. \quad (3.19)$$

Сдвинем начало отсчета энергии в точку $-U_0$ и введем традиционное обозначение

$$U(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2. \quad (3.20)$$

Система с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{x}^2$$

называется *гармоническим осциллятором*.

Найдем энергетический спектр гармонического осциллятора. Так как ни при каких E на всей оси не выполняется условие $E > U(x)$, то движение частицы при любой энергии будет финитным, и существует только дискретный энергетический спектр (ср. (3.6)). Удобно выбрать параметры модели m , ω и константу теории \hbar единичными масштабами. В получающейся системе осцилляторных единиц масштабы длины (L), импульса (P) и энергии (E) равны соответственно

$$L = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad P = \sqrt{\hbar m\omega}, \quad E = \hbar\omega.$$

Введем безразмерные операторы координаты и импульса, сохранив за ними прежние обозначения:

$$\hat{x} := \hat{x} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad \hat{p} := \hat{p} \frac{1}{\sqrt{\hbar m\omega}}.$$

Они удовлетворяют коммутационному соотношению

$$[\hat{x}, \hat{p}] = -i.$$

Введем пару эрмитовски сопряженных операторов

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} + i\hat{p}), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{x} - i\hat{p}). \quad (3.21)$$

Они называются *операторами уничтожения и рождения* (квантов) соответственно. Непосредственным вычислением получается их коммутационное соотношение

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1. \quad (3.22)$$

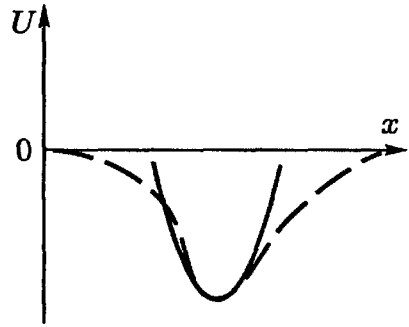


Рис. 4

Гамильтониан гармонического осциллятора, выраженный через операторы рождения и уничтожения, в осцилляторных единицах имеет вид

$$\hat{H} = \hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2}. \quad (3.23)$$

Использование операторов \hat{a} и \hat{a}^+ позволяет найти спектр гармонического осциллятора алгебраическим методом*. Пусть ψ_ε — СФ оператора \hat{H} , отвечающая СЗ ε :

$$\left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2}\right) \psi_\varepsilon = \varepsilon \psi_\varepsilon.$$

Рассмотрим действие оператора \hat{a}^+ на обе части этого стационарного УШ:

$$\begin{aligned} \hat{a}^+ \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2}\right) \psi_\varepsilon &= \left(\hat{a}^+ \hat{a} - \frac{1}{2}\right) \hat{a}^+ \psi_\varepsilon = \varepsilon \hat{a}^+ \psi_\varepsilon, \\ \hat{H} (\hat{a}^+ \psi_\varepsilon) &= (\varepsilon + 1) (\hat{a}^+ \psi_\varepsilon). \end{aligned}$$

Итак, если ψ_ε — собственная функция гамильтониана, отвечающая собственному значению ε , то $\psi_{\varepsilon+1} = \hat{a}^+ \psi_\varepsilon$ есть собственная функция, отвечающая СЗ $\varepsilon + 1$. Считая обе функции нормированными, это утверждение можно выразить равенством

$$\hat{a}^+ \psi_\varepsilon = v \psi_{\varepsilon+1}, \quad (3.24)$$

где v — нормировочный множитель. Аналогично доказывается равенство

$$\hat{a} \psi_\varepsilon = \tilde{v} \psi_{\varepsilon-1}. \quad (3.25)$$

Найдем энергию основного состояния гармонического осциллятора ε_0 . Поскольку среднее значение произведения эрмитовски сопряженных операторов \hat{a}^+ и \hat{a} неотрицательно, минимальное собственное значение гамильтониана (3.23) $\varepsilon_0 \geq 1/2$. Из ограниченности спектра снизу и равенства (3.25) следует, что ВФ основного состояния ψ_0 должна удовлетворять равенству $\hat{a} \psi_0 = 0$ и соответствовать энергии $\varepsilon_0 = 1/2$. Ранее было показано, что разность между последовательными СЗ гамильтониана (3.23) равна единице. Отсюда для энергетического спектра осциллятора (в обычных единицах) получаем

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (3.26)$$

6. Найдем волновые функции стационарных состояний гармонического осциллятора в координатном представлении. ВФ основного состояния удовлетворяет уравнению $\hat{a} \psi_0 = 0$. Используя выражение (3.21), получаем

$$\hat{x} \psi_0 = -\frac{d\psi_0}{dx}, \quad \psi_0 = A \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right).$$

Нормировочный множитель A определяется из условия

$$A^2 \int \psi_0^2(x) dx = A^2 \int e^{-x^2} dx = A^2 \sqrt{\pi} = 1,$$

откуда $A = \pi^{-1/4}$. Итак, нормированная волновая функция основного состояния (рис. 5)

$$\psi_0(x) = \pi^{-1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right).$$

Определим теперь нормировочные множители в выражениях (3.24) и (3.25). Если функция ψ_n нормирована, то

$$\begin{aligned} (\hat{a}^+ \psi_n, \hat{a}^+ \psi_n) &= (\psi_n, \hat{a} \hat{a}^+ \psi_n) = |v|^2, \\ \hat{a} \hat{a}^+ \psi_n &= \left(\varepsilon + \frac{1}{2}\right) \psi_n = (n+1) \psi_n, \\ \hat{a}^+ \psi_n &= \sqrt{n+1} \psi_{n+1}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Аналогично

$$\hat{a} \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}. \quad (3.28)$$

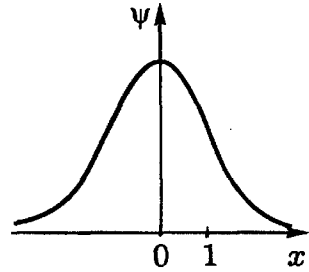


Рис. 5

Эти равенства определяют матричные элементы операторов рождения и уничтожения между нормированными ВФ гармонического осциллятора.

Из соотношения (3.27), используя явный вид оператора рождения, получаем формулу для ВФ n -го стационарного состояния

$$\psi_n(x) = (2^n n \sqrt{\pi})^{-1/2} \left(x - \frac{d}{dx}\right)^n \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right). \quad (3.29)$$

Функции $\psi_n(x)$ можно представить в виде

$$\psi_n(x) = (2^n n \sqrt{\pi})^{-1/2} H_n(x) \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right),$$

где $H_n(x)$ — полиномы n -й степени, известные как полиномы Эрмита. Например,

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_2(x) = 4x^2 - 2.$$

Четность полинома Эрмита совпадает с четностью его номера. Полином Эрмита H_k имеет k действительных корней; это — частный случай осцилляционной теоремы, упомянутой в п. 3.3.

Замена потенциала $U(x)$ потенциалом гармонического осциллятора (3.20) оправдана, если энергия основного состояния мала в сравнении с глубиной ямы ($\hbar\omega \ll U_0$), и если область локализации волновой функции основного состояния $L = \sqrt{\hbar/m\omega}$ мала в сравнении с характерной шириной ямы a . Из сравнения (3.19) и (3.20), считая $f''(0) \sim 1$, имеем

$$\frac{\hbar\omega}{U_0} \sim B^{-1/2}. \quad (3.30)$$

Из этого соотношения вытекает оценка зависимости числа \mathcal{N} уровней дискретного спектра от борновского параметра при $B \gg 1$:

$$\mathcal{N} \sim \sqrt{B}. \quad (3.31)$$

Из формулы (3.30) следует также асимптотический вид зависимости относительных энергий связи ϵ_n от борновского параметра при $B \gg 1$:

$$\epsilon_n \approx 1 - \frac{\lambda}{\sqrt{B}} \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (3.32)$$

где λ — числовая константа, зависящая от формы потенциала.

7. Для описания потенциальных ям часто применяются модели кусочно-постоянных потенциалов. Рассмотрим состояния дискретного спектра в *прямоугольной яме* (рис. 6) — потенциале $U(x)$, заданном уравнениями

$$\begin{aligned} U(x) &= -U_0 \quad (|x| < a), \\ U(x) &= 0 \quad (|x| > a). \end{aligned} \quad (3.33)$$

В безразмерных переменных $y = x/a$, $\epsilon = -E/U_0$ уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{1}{B} \psi'' - f(y) \psi = -\epsilon \psi, \quad (3.34)$$

где $f(y) = 1$ при $|y| < 1$ и $f(y) = 0$ при $|y| > 1$. В области $y > 1$ уравнение $\psi'' = B\epsilon\psi$ имеет убывающее при $y \rightarrow \infty$ решение

$$\psi = A \exp(-\sqrt{B\epsilon}y).$$

Потенциал $U(x)$ четен; следовательно, волновые функции состояний дискретного спектра должны быть либо четны, либо нечетны. Поэтому внутри ямы возьмем решения (3.34) в виде

$$\psi_g(y) = \cos \sqrt{B(1-\epsilon)}y \quad \text{и} \quad \psi_u(y) = \sin \sqrt{B(1-\epsilon)}y.$$

Для четных решений ψ_g из условия непрерывности ψ в точке $y = 1$ имеем

$$\cos \sqrt{B(1-\epsilon)} = A \exp(-\sqrt{B\epsilon}), \quad (3.35)$$

а из условия непрерывности ψ' —

$$-\sqrt{B(1-\epsilon)} \sin \sqrt{B(1-\epsilon)} = -\sqrt{B\epsilon}A \exp(-\sqrt{B\epsilon}). \quad (3.36)$$

Разделив (3.36) на (3.35), получаем уравнение

$$\operatorname{tg} \sqrt{B(1-\epsilon)} = \sqrt{\frac{\epsilon}{1-\epsilon}} = F_g(\epsilon). \quad (3.37)$$

Аналогично для нечетных решений ψ_u находим

$$\operatorname{tg} \sqrt{B(1-\epsilon)} = -\sqrt{\frac{1-\epsilon}{\epsilon}} = F_u(\epsilon). \quad (3.38)$$

Трансцендентные уравнения (3.37) и (3.38) удобно анализировать графически. На рис. 7 показаны графики функций в левых и правых частях равенств (3.37) и (3.38). Функция $F_g(\epsilon)$ в правой части (3.37) на интервале $0 < \epsilon < 1$ пробегает значения от 0 до ∞ . Поэтому при

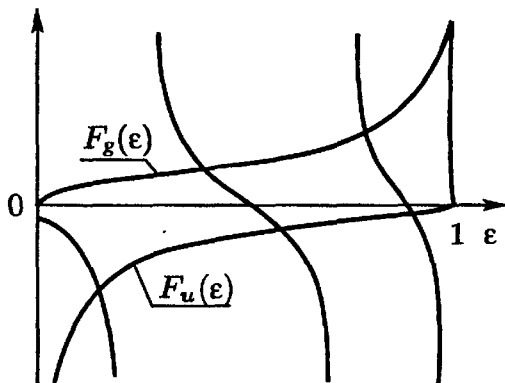


Рис. 7

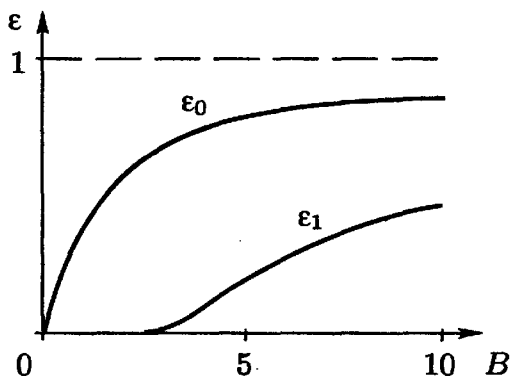


Рис. 8

любом значении B существует по крайней мере один корень (3.37), а с ним — одно связанное состояние, которое описывается четной ВФ. При $B \ll 1$, заменяя тангенс его малым аргументом, из (3.37) получаем для энергии связи основного состояния выражение

$$\epsilon_0 \approx B - 2B^2.$$

Первый член в правой части этого выражения совпадает с результатом, найденным выше в модели δ -ямы. С ростом B первое нечетное решение, соответствующее второму связанному состоянию, появляется при значении $B = \pi^2/4$. Зависимость энергии связи ϵ_n от B для прямоугольной ямы показана на рис. 8.

Непосредственно из графика на рис. 7 видно, что состояния с четными и нечетными ВФ чередуются — как это и должно быть в соответствии с осцилляционной теоремой (п. 3.3). При $B \gg 1$ число корней каждого из уравнений (3.37) и (3.38) приблизительно равно числу ветвей тангенса в интервале изменения его аргумента $(0, \sqrt{B})$: $\mathcal{N}_g \approx \mathcal{N}_u \approx \sqrt{B}/\pi$. Таким образом, полное число \mathcal{N} связанных состояний в прямоугольной яме есть

$$\mathcal{N} \approx \frac{2}{\pi} \sqrt{B}.$$

Эта зависимость совпадает с найденной в п. 3.7 с использованием модели гармонического осциллятора.

8. Стационарные состояния непрерывного спектра описываются функциями, не имеющими нормы в L^2 . Поэтому их нельзя интерпретировать как физически реализуемые состояния частицы (вероятность найти частицу в любой конечной области пространства

есть нуль). Однако рассмотрение асимптотического вида ВФ таких состояний позволяет решить одномерную задачу рассеяния — т. е. ответить на вопрос: с какой вероятностью испущенная источником частица, имеющая энергию, близкую к E , будет зарегистрирована детектором, если между источником и детектором есть область пространства, в которой потенциал $U(x)$ отличен от нуля. Эту вероятность характеризуют коэффициентом прохождения $D(E)$.

В классической механике коэффициент прохождения — ступенчатая функция: $D(E) = 0$, если $E \leq \max U(x)$ и $D(E) = 1$, если $E > \max U(x)$. В квантовой механике $D(E)$ меняется непрерывно от $D(E) = 0$ при $E \rightarrow 0$ до $D(E) = 1$ при $E \rightarrow \infty$. Это отличие носит сразу два названия: при $E \leq \max U(x)$ говорят о *подбарьерном прохождении* квантовой частицы или о ее *туннелировании* через барьер, а при $E > \max U(x)$ — о *надбарьерном отражении*.

Если пределы U_- и U_+ не равны, то потенциал $U(x)$ называется *потенциальной стенкой*: при этом принято выбирать за начало отсчета энергии $U_- = 0$. Если $\max U(x) > \max(U_+, U_-)$, то потенциал $U(x)$ называется *потенциальным барьером*. Показанный на рис. 1 потенциал является и ямой, и стенкой, и барьером.

В задаче рассеяния движение частицы при $|x| \rightarrow \infty$ будет предполагаться асимптотическим свободным. Поэтому начнем с рассмотрения свободного движения. Одномерное УШ в координатном представлении

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' = E\psi$$

своим общим решением имеет

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx},$$

где введено обозначение

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (3.39)$$

для волнового числа.

В условиях нормировки (см. п. 1.16)

$$\int \psi^*(\mu, x)\psi(\nu, x) dx = \delta(\mu - \nu)$$

можно под μ и ν понимать как импульс p , так и энергию E . В первом случае коэффициенты A и B должны удовлетворять условию

$$|A|^2 + |B|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}.$$

Во втором случае (нормировка на δ -функцию от энергии) коэффициенты должны удовлетворять условию

$$|A|^2 + |B|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}}.$$

Заметим, что размерность ВФ непрерывного спектра меняется в зависимости от способа нормировки.

9. Рассмотрим стационарные состояния непрерывного спектра частицы в потенциальном поле — например, показанном на рис. 1. Решением стационарной задачи рассеяния является ВФ с асимптотиками вида

$$\psi_L(x) \sim e^{ik_-x} + Ae^{-ik_-x} \quad (x \rightarrow -\infty), \quad (3.40)$$

$$\psi_R(x) \sim Be^{ik_+x} \quad (x \rightarrow \infty), \quad (3.41)$$

где

$$k_{\pm} = \frac{\sqrt{2m(E - U_{\pm})}}{\hbar}.$$

О компонентах этих асимптотик принято говорить, что e^{ik_-x} соответствует падающей частице, Ae^{-ik_-x} — отраженной, а Be^{ik_+x} — прошедшей через потенциал. Коэффициентом прохождения $D(E)$ называется отношение плотностей потоков вероятностей прошедшей и падающей компонент:

$$D(E) = \frac{k_+}{k_-} |B|^2. \quad (3.42)$$

Аналогично, коэффициентом отражения $R(E)$ называется отношение плотностей потоков вероятностей отраженной и падающей компонент,

$$R(E) = |A|^2. \quad (3.43)$$

Можно показать, что эти коэффициенты удовлетворяют соотношению $D(E) + R(E) = 1$, если только гамильтониан \hat{H} эрмитов — для чего потенциал $U(x)$ должен быть действительной функцией.

Рассмотрим одномерное рассеяния на δ -потенциале. Уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' - q\delta(x)\psi = E\psi.$$

Его решение совпадает с асимптотиками (3.40), (3.41) при всех $x \neq 0$:

$$\psi_L = e^{ikx} + Ae^{-ikx} \quad (x < 0), \quad \psi_R = Be^{ikx} \quad (x > 0).$$

Из условия непрерывности ВФ в точке $x = 0$ имеем уравнение

$$1 + A = B,$$

а из условия заданной величины скачка производной (3.17) получаем

$$ik(A + B - 1) = \frac{2mq}{\hbar^2}B.$$

Отсюда

$$A = \frac{\varkappa}{ik - \varkappa}, \quad B = \frac{ik}{ik - \varkappa}, \quad \varkappa = \frac{mq}{\hbar^2}.$$

Коэффициент прохождения

$$D(E) = \frac{k^2}{k^2 + \alpha^2}$$

не зависит от знака q . Последнюю формулу можно записать также в виде

$$D(E) = \frac{E}{E + E_0}, \quad (3.44)$$

где E_0 — энергия связи частицы в δ -яме емкости q . Область применимости полученного результата будет исследована ниже.

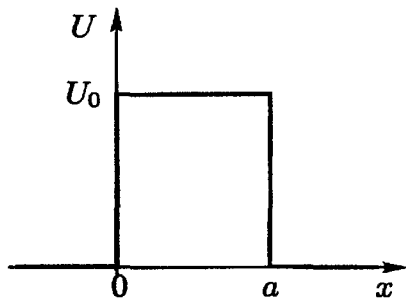


Рис. 9

10. Рассмотрим одномерное рассеяние на потенциале прямоугольного барьера $U(x) = 0$ при $x < 0$ и $x > a$ и $U(x) = U_0$ при $0 < x < a$ (рис. 9). При $x < 0$ и $x > a$ ВФ совпадает с асимптотиками

$$\psi_L = e^{ikx} + Ae^{-ikx} \quad (x < 0),$$

$$\psi_R = Ce^{ikx} \quad (x > a).$$

В области, где потенциал отличен от нуля, УШ имеет решение

$$\psi_M = B_1 e^{iqx} + B_2 e^{-iqx},$$

где величина

$$q = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E - U_0)}$$

может быть и мнимой (при $E < U_0$). Из условий непрерывности ψ и ψ' в точке $x = 0$ следует система уравнений для A , B_1 и B_2 :

$$1 + A = B_1 + B_2, \quad k(1 - A) = q(B_1 - B_2).$$

Из условий непрерывности в точке $x = a$ аналогично получаем уравнения, связывающие B_1 , B_2 и C :

$$B_1 e^{iqa} + B_2 e^{-iqa} = C e^{ika}, \quad q(B_1 e^{iqa} - B_2 e^{-iqa}) = k C e^{ika}.$$

Решая эти уравнения относительно C , находим коэффициент прохождения

$$D(E) = \frac{4k^2 q^2}{(k^2 - q^2) \sin^2 qa + 4k^2 q^2}.$$

Это выражение может быть записано также в виде

$$D(E) = \left\{ 1 + \frac{B^2}{4} \left[\frac{\sin qa}{kqa^2} \right]^2 \right\}^{-1}, \quad (3.45)$$

где B — борновский параметр. Зависимость $D(E)$ для прямоугольного барьера показана на рис. 10.

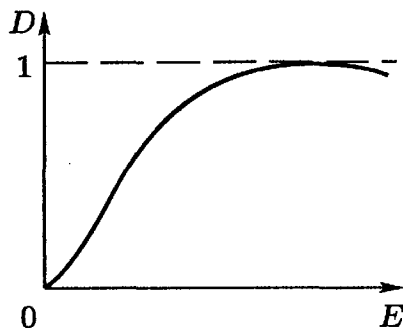


Рис. 10

Рассмотрим предельные случаи. При $E \ll U_0$ (подбарьерное прохождение частицы с малой энергией) q мнимое; коэффициент прохождения

$$D(E) \approx 16\varepsilon(1 - \varepsilon) \exp \left[-2\sqrt{B(1 - \varepsilon)} \right]$$

оказывается экспоненциально малым. Для надбарьерного прохождения частиц высокой энергии ($E \gg U_0$) коэффициент прохождения близок к единице и не зависит от знака U_0 :

$$D(E) \approx 1 - \frac{1}{4} \left(\frac{U_0}{E} \right)^2 \sin^2 qa.$$

Кроме того, при выполнении условия $\sin qa = 0$ $qa = n\pi$ (n — целое), т. е. при значениях энергии частицы

$$E_{(n)} = U_0 \left[1 + \pi^2 \frac{n^2}{B} \right]$$

коэффициент прохождения обращается в единицу: барьер прозрачен.

Зависимость $D \propto \exp(-2\sqrt{B})$ для подбарьерного прохождения с $E \ll U_0$ имеет достаточно типичный характер. Напротив, закон убывания $R = 1 - D \propto E^{-2}$ для коэффициента надбарьерного отражения и обращение R в нуль при некоторых энергиях суть специфические свойства прямоугольного барьера.

11. Уравнение Шредингера является частным случаем уравнений вида

$$\hat{L}\psi = \lambda\psi, \tag{3.46}$$

где \hat{L} — эрмитов оператор, а на функцию ψ наложены однородные граничные условия, т. е. такие, которым удовлетворяет и функция $\psi \equiv 0$. Функция двух переменных $G(x, x')$, удовлетворяющая уравнению

$$\hat{L}_x G(x, x') - \lambda G(x, x') = \delta(x - x'), \tag{3.47}$$

называется *функцией Грина* (ФГ) для уравнения (3.46).

Перепишем одномерное УШ в виде

$$\psi'' - u(x)\psi = -k^2\psi, \tag{3.48}$$

где введено обозначение $u(x) = 2mU(x)\hbar^{-2}$, а k — волновое число (3.39). ФГ уравнения (3.48) связана с его линейно независимыми решениями. По определению

$$\frac{d^2}{dx^2} G(x, x') + [k^2 - u(x)] G(x, x') = \delta(x - x').$$

Интегрируя это выражение по x от $x' - 0$ до $x' + 0$ и учитывая

конечность $u(x)$, имеем

$$\begin{aligned} G'(x' + 0, x') - G'(x' - 0, x') &= 1, \\ G(x' + 0, x') - G(x' - 0, x') &= 0. \end{aligned}$$

Итак, функция Грина в окрестности точки $x = x'$ непрерывна, а ее производная скачком меняется на единицу. Пусть

$$\begin{aligned} G(x, x') &= f(x)g(x') \quad (x < x'), \\ G(x, x') &= g(x)f(x') \quad (x > x'), \end{aligned}$$

где f и g — решения (3.48), удовлетворяющие однородным условиям. Функция $G(x, x')$ будет функцией Грина, если

$$-\frac{df}{dx}g + \frac{dg}{dx}f = 1. \quad (3.49)$$

Найдем ФГ для УШ, описывающего свободное движение частицы. Положим

$$f = e^{-ikx}, \quad g = Ae^{ikx},$$

где A — константа. Тогда

$$G = Ae^{ik(x-x')} \quad (x < x'), \quad G = Ae^{-ik(x-x')} \quad (x > x').$$

Требуя выполнения (3.49), находим $A = -i/(2k)$. Итак, ФГ для одномерного УШ, описывающего свободное движение с волновым числом k , есть

$$G(x, x') = -\frac{i}{2k}e^{ik|x-x'|}. \quad (3.50)$$

12. Рассмотрим неоднородное уравнение

$$\hat{L}\psi - \lambda\psi = Q(x).$$

С помощью ФГ его решение может быть записано в виде

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int G_0(x, x')Q(x')dx',$$

где $\psi_0(x)$ и $G_0(x, x')$ — общее решение и ФГ однородного уравнения (3.46). Выше мы элементарными средствами нашли ФГ для свободной частицы. Представляя УШ для частицы в потенциальном поле (3.48) в виде неоднородного уравнения с правой частью $Q(x) = u(x)\psi(x)$, мы можем записать его общее решение в виде

$$\psi(x) = \psi_0(x) + \int G_0(x, x')u(x')\psi(x')dx'. \quad (3.51)$$

Интегральное уравнение (3.51) позволяет получить приближенные решения задачи рассеяния. Используя (3.50), для одномерного УШ

имеем

$$\psi(x) = \psi_0(x) - \frac{i}{2k} \int_{-\infty}^x e^{-ikx'} u(x') \psi(x') dx' - \\ - \frac{i}{2k} \int_x^{\infty} e^{ikx'} u(x') \psi(x') dx'.$$

Будем искать решение методом итераций. В нулевом приближении возьмем $\psi(x) = \psi_0(x) = \exp(ikx)$. Подставляя это выражение в правую часть (3.51), найдем вид функции первого приближения $\psi^{(1)}(x)$. При $x \rightarrow \infty$

$$\psi^{(1)}(x) \approx e^{ikx} \left(1 - \frac{i}{2k} \int_{-\infty}^{\infty} u(x') dx' \right) = B e^{ikx}, \quad (3.52)$$

а при $x \rightarrow -\infty$

$$\psi^{(1)}(x) \approx e^{ikx} - \frac{i}{2k} e^{-ikx} \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ikx'} u(x') dx' = e^{ikx} + A e^{-ikx}. \quad (3.53)$$

Асимптотики найденного решения удовлетворяют граничным условиям задачи рассеяния (3.40), (3.41). Коэффициент отражения,

$$R(E) = \frac{m}{2E\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} e^{2ikx} U(x) dx \right|^2, \quad (3.54)$$

не зависит от знака потенциала: для ямы и барьера одинаковой формы коэффициенты отражения равны. Это возможно только для надбарьерного отражения частиц высокой энергии, когда $R \ll 1$.

Применение (3.54) к случаю δ -потенциала дает

$$R(E) = \frac{mq^2}{2E\hbar^2} = \frac{E_0}{E},$$

где E_0 — энергия связи в δ -яме. Это совпадает с первым членом разложения точного выражения $R = E_0 (E + E_0)^{-1}$ по степеням E_0/E .

Для потенциалов $U(x)$, непрерывных на оси x со всеми производными, формула (3.54) дает при $E \rightarrow \infty$ экспоненциальный закон убывания коэффициента отражения: обычно $R(E) \propto \exp(-\lambda ka)$, где λ — число порядка единицы. Коэффициент прохождения,

вычисленный из (3.52),

$$D(E) = 1 + \frac{m}{2E\hbar^2} \left(\int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx \right)^2$$

оказывается больше единицы: область, в которой потенциал отличен от нуля, становится источником частиц. Это — следствие приближенности найденного решения; оно применимо при $D - 1 \ll 1$.

13. Особый случай представляют потенциалы, ограниченные по величине, но не стремящиеся к определенным пределам при $x \rightarrow \pm\infty$. Такие потенциалы применяются для описания поведения электронов в конденсированном веществе. Простейшим примером являются модели, в которых потенциал $U(x)$ является периодическим. Рассмотрим модель Кронига–Пенни — движение частицы в поле с потенциалом

$$U(x) = q \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + na). \quad (3.55)$$

Будем считать $q > 0$. В интервале $0 < x < a$ УШ описывает свободное движение, и ВФ имеет вид

$$\psi = Ae^{iKx} + Be^{-iKx}, \quad (3.56)$$

где $K = \sqrt{2mE}/\hbar$ есть волновое число. На основании теоремы Блоха (п. 2.11) в интервале $a < x < 2a$ имеем

$$\psi = e^{ika} \left[Ae^{iK(x-a)} + Be^{-iK(x-a)} \right], \quad (3.57)$$

где k — квазиимпульс, деленный на \hbar . Сшивая выражения (3.56) и (3.57) в точке $x = a$, из непрерывности ψ имеем

$$(A + B)e^{ika} = Ae^{iKa} + Be^{-iKa},$$

а из условия на скачок производной (3.17) —

$$iK \left\{ (A - B)e^{ika} - Ae^{iKa} + Be^{-iKa} \right\} = \frac{2mq}{\hbar^2} (Ae^{iKa} + Be^{-iKa}).$$

Эта система двух однородных линейных уравнений для коэффициентов A и B имеет нетривиальные решения, если ее детерминант обращается в нуль. Отсюда получается уравнение

$$\cos ka = Q \frac{\sin Ka}{Ka} + \cos Ka, \quad (3.58)$$

где $Q = mqa\hbar^{-2}$ — безразмерный параметр. Правую часть уравнения (3.58) обозначим как $F(Ka)$; график этой функции изображен

на рис. 11. При любом значении k это уравнение имеет бесконечно много корней $K_n(k)$, которым соответствуют энергии $E_n(k) = \hbar^2 K_n^2 / (2m)$. Однако эти значения не заполняют всю ось энергий. Равенство (3.58) возможно при таких K , что $|F(Ka)| < 1$. На рис. 11 такие области отмечены толстыми линиями на оси K . Непрерывный спектр энергий разбивается на ряд ограниченных областей — энергетических зон. К точкам $Ka = n\pi$ справа примыкают запрещенные зоны — области, в которых $|F(Ka)| > 1$, а потому отсутствуют ограниченные решения УШ. С ростом энергии E запрещенные зоны на оси Ka сужаются: левая часть (3.58) принимает значение $(-1)^n$, когда

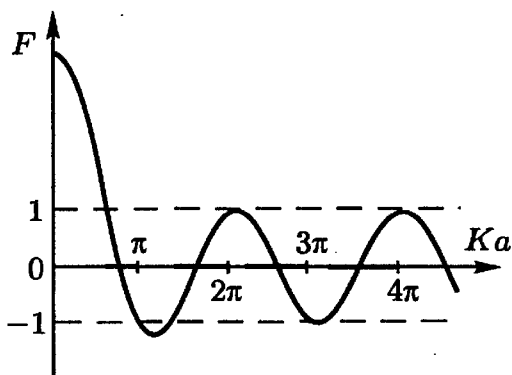


Рис. 11

$$\cos(Ka - \varphi) = (-1)^n \cos \varphi, \quad \operatorname{tg} \varphi = \frac{Q}{Ka},$$

т. е. при $Ka = n\pi$ и при $Ka = n\pi + 2\varphi$. Отсюда следует, что ширина запрещенных зон $\Delta = 2 \operatorname{arctg} (Q/Ka)$. При больших n имеем $\Delta \approx 2Q/(n\pi)$.

14. Собственные функции операторов \hat{p} и \hat{x} не принадлежат классу L^2 . Поэтому они не описывают физически реализуемые состояния частицы; эти СФ следует рассматривать как базисные функции, образующие полную систему в смысле соотношений (1.15), (1.16). Поскольку в физически реализуемых состояниях значения p и x описываются некоторыми распределениями вероятностей, наряду со средними значениями \bar{p} и \bar{x} представляют интерес и вторые центральные моменты — дисперсии этих величин. Дисперсию величины A

$$\overline{\Delta A^2} = \langle \psi | (\hat{A} - \bar{A})^2 | \psi \rangle \quad (3.59)$$

можно рассматривать как меру неопределенности ее значений. Дисперсии значений величин, которым соответствуют некоммутирующие операторы, связаны с коммутатором этих операторов:

$$[\hat{x}, \hat{y}] = i\hat{A}. \quad (3.60)$$

Рассмотрим среднее значение оператора $\hat{L}^+ \hat{L}$, где

$$\hat{L} = (\hat{x} - \bar{x}) + i\gamma(\hat{y} - \bar{y}),$$

операторы \hat{x} и \hat{y} эрмитовы, а γ — действительный параметр. Собственные значения оператора $\hat{L}^+ \hat{L}$ неотрицательны (см. задачу 1.15),

поэтому неотрицательно и среднее значение

$$\langle \psi | \{(\hat{x} - \bar{x}) - i\gamma(\hat{y} - \bar{y})\} \{(\hat{x} - \bar{x}) + i\gamma(\hat{y} - \bar{y})\} | \psi \rangle \geq 0,$$

$$\langle \psi | \overline{\Delta x^2} + \gamma^2 \overline{\Delta y^2} + i\gamma[\hat{x}, \hat{y}] | \psi \rangle \geq 0.$$

Используя равенство (3.60), из последнего соотношения находим

$$\overline{\Delta x^2} + \gamma^2 \overline{\Delta y^2} - \gamma \bar{A} \geq 0.$$

Поскольку это неравенство выполняется при любом значении γ , то дискриминант трехчлена неположителен, т. е. $\bar{A}^2 - 4\overline{\Delta x^2} \overline{\Delta y^2} \leq 0$. Итак, имеет место неравенство

$$\overline{\Delta x^2} \overline{\Delta y^2} \geq \frac{\bar{A}^2}{4}. \quad (3.61)$$

Это выражение называется *соотношением неопределенностей* Гайзенберга. Отметим, что для его вывода необходима эрмитовость операторов \hat{x} , \hat{y} . Поэтому соотношение (3.61) неприменимо для состояний, которые описываются собственными функциями операторов \hat{x} и \hat{y} .

Коммутатор операторов координаты и компоненты импульса в декартовых координатах пропорционален единичному оператору:

$$[\hat{p}_i, \hat{x}_i] = -i\hbar.$$

Поэтому в любых состояниях, описываемых ВФ из L^2 , будет выполняться соотношение неопределенностей

$$\overline{\Delta p^2} \overline{\Delta x^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}. \quad (3.62)$$

В классической механике значения p и x определены одновременно. В этом смысле состояния, наиболее близкие к классическим, будут описываться ВФ с минимальным произведением неопределенностей. Им соответствует знак равенства в формуле (3.62). В силу неотрицательности СЗ оператора $\hat{L}^+ \hat{L}$ такие состояния должны описываться СФ оператора \hat{L} с собственным значением, равным нулю. Отсюда получаем уравнение

$$\left(x + \gamma\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi = \lambda \psi, \quad \lambda = \bar{x} + i\gamma\bar{p}. \quad (3.63)$$

Нормированное решение уравнения (3.63) имеет вид

$$\psi(x) = \left(2\pi\overline{\Delta x^2}\right)^{-1/4} \exp\left[-\frac{(x - \bar{x})^2}{4\overline{\Delta x^2}} + i\frac{\bar{p}x}{\hbar}\right], \quad (3.64)$$

где $\overline{\Delta x^2} = \hbar\gamma$. Оператор в левой части (3.62) лишь размерным множителем отличается от оператора уничтожения \hat{a} для гармонического осциллятора, введенного в п. 3.6. Таким образом, состояния с ВФ (3.64) могут быть определены уравнением

$$\hat{a}\psi = \lambda\psi,$$

где λ — произвольный комплексный множитель. Состояния, описываемые ВФ, удовлетворяющими этому уравнению, называются *когерентными состояниями** гармонического осциллятора.

ЗАДАЧИ

1. Для изображенного на рис. 1 потенциала показать, что для значений энергии $E < U_-$ ВФ стационарного состояния может иметь нули только в области, где $E > U(x)$.

2. Показать, что для одномерного УШ все ВФ дискретного спектра имеют вид $\psi(x) = \exp i\gamma \cdot f(x)$, где γ — число, а $f(x)$ — действительная функция. Отсюда следует, что в связанных состояниях плотность потока вероятности всюду равна нулю. Поэтому ВФ связанных состояний одномерного УШ мы всюду считаем действительными.

3. Доказать, что в поле с четным потенциалом $U(x)$ ВФ дискретного спектра либо четны, либо нечетны.

4. Может ли состояние с энергией связи, равной нулю, принадлежать дискретному спектру?

5. Исследовать дискретный спектр частицы в поле двух симметричных δ -ям

$$U(x) = -q\delta(x-a) - q\delta(x+a).$$

Такая модель может быть охарактеризована величиной безразмерного параметра $Q = 2mqa\hbar^{-2}$.

а) Найти, при каком значении Q_1 параметра Q в этом потенциале появляется второе связанное состояние.

б) Найти асимптотический вид зависимости E_1 от Q при $Q \approx Q_1$.

в) Найти приближенный вид зависимости разности энергий двух связанных состояний $\Delta = E_1 - E_0$ от Q при $Q \gg 1$.

6. Исследовать спектр частицы в поле

$$U(x) = -q\delta(x-a) + q\delta(x+a).$$

При каком условии в этом потенциале будет существовать связанное состояние?

7. Найти спектр частицы в поле

$$U(x) = \frac{m\omega^2}{2} \left(x^2 + Fx \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \right).$$

8. При каких значениях параметров λ и μ движение частицы в потенциале

$$U(x, y) = \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + \mu^2 y^2 + 2\lambda xy)$$

финитно? Найти для этого случая уровни энергии частицы.

9. Найти энергетический спектр системы N частиц одинаковой массы m в трехмерном пространстве, если их попарное взаимодействие описывается осцилляторным потенциалом

$$U(\mathbf{r}_{ij}) = \frac{m\omega^2}{2} \mathbf{r}_{ij}^2$$

(\mathbf{r}_{ij} — вектор расстояния между i -й и j -й частицами).

У к а з а н и е. Рассмотреть классические уравнения движения системы.

10. Классическая частица, совершающая малые колебания с энергией $E = \hbar\omega/2$, не выходит за пределы интервала $|x| < \sqrt{\hbar/m\omega}$. Какова вероятность найти квантовую частицу с той же энергией вне этого интервала?

11. Доказать, что волновые функции стационарных состояний гармонического осциллятора $\psi_n(x)$ являются собственными функциями оператора Фурье и имеют ту же форму в импульсном представлении.

12. Найти спектр частицы в поле

$$U(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 \quad (x > 0), \quad U(x) = \infty \quad (x < 0).$$

13. Найти зависимость ϵ_1 от B вблизи порога появления второго связанного состояния в прямоугольной яме $B \geq B_1 = \pi/4$.

14. Найти зависимость относительных энергий связи ϵ_n от B и n при $B \gg 1$.

15. Свободная частица находится в состоянии с ВФ $\psi(x) = A \exp(ik_1x) + B \exp(ik_2x)$. Вычислить среднее значение и дисперсию ее энергии.

16. Показать, что коэффициенты $D(E)$ и $R(E)$ не зависят от направления движения падающей частицы.

17. Асимптотика ВФ за барьером $\psi_R = |A| \exp[i(kx + \Delta)]$ сдвинута по фазе относительно падающей волны $\psi_i = e^{ikx}$. Найти связь между фазовым сдвигом Δ и коэффициентом прохождения.

18. Используя (3.54), найти коэффициент отражения частицы высокой энергии в поле прямоугольного барьера; сравнить ответ с точным выражением.

19. При $q < 0$ в модели Кронига–Пенни может существовать энергетическая зона с $E < 0$. Исследовать ее положение и ширину в зависимости от параметра Q — в частности, при $Q \gg 1$.

В предыдущих задачах и в тексте мы рассматривали решение УШ исключительно в координатном представлении. Это объясняется типичной структурой гамильтониана $\hat{H}(\hat{p}, \hat{x})$: кинетическая энергия квадратична по импульсам, и при любом виде $\hat{U}(\hat{x})$ мы получаем дифференциальное уравнение 2-го порядка. Напротив, потенциальная энергия $\hat{U}(\hat{x})$ содержит, в общем случае, произвольно высокие степени \hat{x} , что при переходе в импульсное представление приводит к дифференциальным уравнениям высокого (или неограниченного) порядка. В общем случае УШ в импульсном представлении может быть записано как интегральное уравнение. Решение этого уравнения в явном виде тоже возможно лишь в небольшом числе случаев.

20. Найти нормированные ВФ стационарных состояний в импульсном представлении для частицы в однородном поле.

21. Найти спектр частицы в поле

$$U(x) = 0 \quad (x < 0), \quad U(x) = -\frac{\alpha}{x} \quad (x > 0),$$

решая задачу в импульсном представлении.

22. Найти спектр частицы в поле $U(x) = -q\delta(x)$, решая задачу в импульсном представлении.

МОМЕНТ

0. Для построения явного вида оператора момента импульса мы могли бы воспользоваться правилами сопоставления, изложенными в п. 2.1. Однако в квантовой механике угловой момент не есть, вообще говоря, оператор, выражающийся только через \hat{x}_i и \hat{p}_k и действующий только на функции координат. Поэтому мы вначале установим коммутационные соотношения между компонентами оператора момента. Для этого мы используем связь между операторами проекций момента и унитарными операторами, осуществляющими преобразование поворота системы координат. Эти коммутационные соотношения справедливы как для оператора орбитального момента, выражающегося через \hat{x}_i и \hat{p}_k , так и для спинового момента, не имеющего классического аналога. Затем на основе коммутационных соотношений мы найдем спектр оператора момента и его явный вид в различных представлениях.

1. Пусть в каждой точке «неподвижного» пространства определена некоторая функция $\psi(x, y, z)$. Рассмотрим две декартовых системы координат Σ, Σ' . Система Σ' получена из Σ путем поворота вокруг оси z на угол φ . Сравним значение рассматриваемой функции в двух точках «неподвижного» пространства, координаты которых в системах Σ и Σ' имеют одно и то же значение (x, y, z) . Под «неподвижным» пространством мы понимаем некоторую систему координат, отличную от Σ и Σ' . Обозначим через $\psi'(x, y, z)$ и $\psi(x, y, z)$ значения функции в системах Σ' и Σ соответственно. Очевидно, что

$$\psi'(x, y, z) = \psi(x \cos \varphi - y \sin \varphi, x \sin \varphi + y \cos \varphi, z). \quad (4.1)$$

Так как выбор системы координат не меняет нормировки ВФ, то преобразование функций осуществляется унитарным оператором. Для того чтобы установить вид оператора $\hat{U}^+(\varphi)$, который функции $\psi(x, y, z)$ ставит в соответствие функцию $\psi'(x, y, z)$, рассмотрим бесконечно малый поворот на угол $d\varphi$. Сохраняя в (4.1) только линейные по $d\varphi$ члены, имеем

$$\psi'(x, y, z) \approx \psi(x - yd\varphi, xd\varphi + y, z) = (1 + i\hat{l}_z d\varphi)\psi(x, y, z).$$

Здесь введено обозначение

$$\hat{l}_z = \hbar^{-1} (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x),$$

которое соответствует оператору z -проекции момента импульса, построенного по правилам п. 2.1 и деленному на \hbar . Легко убедиться,

что при повороте на конечный угол φ получим

$$\psi'(x, y, z) = e^{i\hat{l}_z\varphi}\psi(x, y, z). \quad (4.2)$$

Таким образом,

$$\hat{U}^+(\varphi) = e^{i\hat{l}_z\varphi}.$$

2. Рассмотрим некоторый векторный оператор \hat{A} , действующий на функции координат $\psi(x, y, z)$. Потребуем, чтобы компоненты \hat{A}_x , \hat{A}_y , \hat{A}_z имели один и тот же вид в системах Σ' и Σ . Разумеется, средние значения оператора \hat{A} , вычисленные в системах Σ' , Σ , должны совпадать, если рассматривать их из «неподвижного» пространства:

$$\begin{aligned} \int \psi'^*(x, y, z)(\hat{A}_x\mathbf{i}' + \hat{A}_y\mathbf{j}' + \hat{A}_z\mathbf{k}')\psi'(x, y, z) dx = \\ = \int \psi^*(x, y, z)(\hat{A}_x\mathbf{i} + \hat{A}_y\mathbf{j} + \hat{A}_z\mathbf{k})\psi(x, y, z) dx. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Рассмотрим следствие этого равенства. Поскольку орты систем Σ , Σ' связаны соотношениями

$$\begin{aligned} \mathbf{i}' &= \mathbf{i} \cos \varphi + \mathbf{j} \sin \varphi, \\ \mathbf{j}' &= -\mathbf{i} \sin \varphi + \mathbf{j} \cos \varphi, \\ \mathbf{k}' &= \mathbf{k}, \end{aligned} \quad (4.4)$$

а функции $\psi'(x, y, z)$ и $\psi(x, y, z)$ связаны унитарным преобразованием (4.2), то подставляя (4.2) и (4.4) в (4.3), получим

$$\begin{aligned} e^{i\hat{l}_z\varphi}\hat{A}_xe^{-i\hat{l}_z\varphi} &= \hat{A}_x \cos \varphi - \hat{A}_y \sin \varphi, \\ e^{i\hat{l}_z\varphi}\hat{A}_ye^{-i\hat{l}_z\varphi} &= \hat{A}_x \sin \varphi + \hat{A}_y \cos \varphi, \\ e^{i\hat{l}_z\varphi}\hat{A}_ze^{-i\hat{l}_z\varphi} &= \hat{A}_z. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Рассмотрим бесконечно малый поворот и раскладывая левые части равенств (4.5), находим коммутационные соотношения

$$\begin{aligned} [\hat{l}_z, \hat{A}_x] &= i\hat{A}_y, \\ [\hat{l}_z, \hat{A}_y] &= -i\hat{A}_x, \\ [\hat{l}_z, \hat{A}_z] &= 0. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Аналогичным путем можно получить коммутационные соотношения между компонентами \hat{A}_x , \hat{A}_y , \hat{A}_z и операторами \hat{l}_x , \hat{l}_y .

3. Итак, мы получили коммутационные соотношения (4.6), основываясь на следующих требованиях:

а) ВФ при переходе от Σ к Σ' преобразуются согласно (4.2);

б) компоненты векторного оператора $\hat{A}_x, \hat{A}_y, \hat{A}_z$ имеют один и тот же вид в различных системах Σ, Σ' ;

в) векторы среднего значения векторного оператора \hat{A} в системах Σ и Σ' совпадают для наблюдателя в «неподвижном» пространстве.

Можно перейти к другому представлению, в котором координатная ВФ при переходе от Σ к Σ' не меняется, а сами векторные операторы преобразуются как векторы. Переход к такому представлению в случае поворота на угол φ вокруг оси z осуществляется оператором $\hat{U}(\varphi)$:

$$e^{-i\hat{l}_z\varphi}\psi'(x, y, z) = \psi(x, y, z)$$

При этом

$$e^{-i\hat{l}_z\varphi}\hat{A}e^{i\hat{l}_z\varphi} = \hat{A}',$$

или, используя формулы (4.5),

$$\begin{aligned}\hat{A}'_x &= \hat{A}_x \cos \varphi + \hat{A}_y \sin \varphi = e^{-i\hat{l}_z\varphi} \hat{A}_x e^{i\hat{l}_z\varphi}, \\ \hat{A}'_y &= -\hat{A}_x \sin \varphi + \hat{A}_y \cos \varphi = e^{-i\hat{l}_z\varphi} \hat{A}_y e^{i\hat{l}_z\varphi}, \\ \hat{A}'_z &= \hat{A}_z = e^{-i\hat{l}_z\varphi} \hat{A}_z e^{i\hat{l}_z\varphi}.\end{aligned}$$

Разумеется, переход к новому представлению осуществляется унитарным оператором, поэтому коммутационные соотношения (4.6) не изменяются. Такое представление удобно для нахождения интегралов движения. Заметим, что оператор \hat{A}^2 есть инвариант по отношению к поворотам:

$$e^{-i\hat{l}_z\varphi}\hat{A}^2e^{i\hat{l}_z\varphi} = \hat{A}'^2 = \hat{A}^2.$$

Следовательно,

$$[\hat{l}_i, \hat{A}^2] = 0. \quad (4.7)$$

Если оператор Гамильтона имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r),$$

то при вращении вокруг произвольной оси, проходящей через начало координат, он сохраняет свой вид. Следовательно,

$$[\hat{l}_i, \hat{H}] = 0,$$

и операторы \hat{l}_i являются интегралами движения.

Отметим, что представление, рассмотренное в п. 4.2, аналогично представлению Шредингера — используются инвариантные операторы и преобразующиеся функции, а представление, рассмотренное в п. 4.3, аналогично представлению Гайзенберга — используются инвариантные функции и преобразующиеся операторы.

4. Пусть \hat{A}_i суть компоненты векторного оператора, действующего на функции координат. Операторы \hat{l}_i , удовлетворяющие коммутационным соотношениям

$$[\hat{l}_i, \hat{A}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{A}_k, \quad (4.8)$$

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{l}_k, \quad (4.9)$$

где ε_{ijk} — единичный антисимметричный тензор, называются компонентами оператора *орбитального момента*. Далее, из (4.7) следует:

$$[\hat{l}_i, \hat{l}^2] = 0. \quad (4.10)$$

Разумеется, (4.10) можно получить и как непосредственное следствие из (4.9). Имея в виду дальнейшее обобщение, рассмотрим спектр векторного оператора момента \hat{J} , компоненты которого удовлетворяют соотношениям

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_k] = i\varepsilon_{ikj}\hat{J}_j.$$

Оператор квадрата момента \hat{J}^2 коммутирует с каждой из его компонент. Следовательно, существует общая система СФ:

$$\hat{J}^2\psi_{\gamma\mu} = \gamma\psi_{\gamma\mu},$$

$$\hat{J}_i\psi_{\gamma\mu} = \mu\psi_{\gamma\mu}.$$

Операторы \hat{J}_i и \hat{J}_k ($i \neq k$) не коммутируют и общей системы СФ не имеют. Найдем спектры операторов \hat{J}^2 и \hat{J}_z . Введем операторы

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y,$$

$$\hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y.$$

Рассмотрим коммутатор $[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm]$:

$$\hat{J}_z\hat{J}_\pm - \hat{J}_\pm\hat{J}_z = [\hat{J}_z, \hat{J}_x] \pm i[\hat{J}_z, \hat{J}_y] = i\hat{J}_y \pm \hat{J}_x,$$

$$\hat{J}_z\hat{J}_\pm = \hat{J}_\pm(\hat{J}_z \pm 1),$$

$$\hat{J}_z(\hat{J}_\pm\psi_{\gamma\mu}) = (\mu \pm 1)(\hat{J}_\pm\psi_{\gamma\mu}).$$

Следовательно, $\hat{J}_\pm\psi_{\gamma\mu}$ суть также СФ \hat{J}_z с собственным значением $\mu \pm 1$, т. е.

$$\hat{J}_+\psi_{\gamma,\mu-1} = \alpha_\mu\psi_{\gamma\mu},$$

$$\hat{J}_-\psi_{\gamma\mu} = \beta_\mu\psi_{\gamma,\mu-1}.$$

Так как

$$\alpha_\mu^* = (\hat{J}_+\psi_{\gamma,\mu-1}, \psi_{\gamma\mu}) = (\psi_{\gamma,\mu-1}, \hat{J}_-\psi_{\gamma\mu}) = \beta_\mu,$$

то подбором фазового множителя вида e^{ia} (a — действительное) для функций $\psi_{\gamma\mu}$ можно сделать α_μ действительным и равным β_μ . Тогда

$$\widehat{J}_+\psi_{\gamma,\mu-1} = \alpha_\mu\psi_{\gamma\mu}, \quad \widehat{J}_-\psi_{\gamma\mu} = \alpha_\mu\psi_{\gamma,\mu-1}. \quad (4.11)$$

Так как

$$\gamma = (\psi_{\gamma\mu}, [\widehat{J}_x^2 + \widehat{J}_y^2 + \widehat{J}_z^2]\psi_{\gamma\mu}) = \mu^2 + a + b,$$

$$a = (\psi_{\gamma\mu}, \widehat{J}_x^2\psi_{\gamma\mu}) = (\widehat{J}_x\psi_{\gamma\mu}, \widehat{J}_x\psi_{\gamma\mu}) \geq 0,$$

$$b = (\psi_{\gamma\mu}, \widehat{J}_y^2\psi_{\gamma\mu}) = (\widehat{J}_y\psi_{\gamma\mu}, \widehat{J}_y\psi_{\gamma\mu}) \geq 0$$

(норма любой функции неотрицательна), то

$$\gamma \geq \mu^2.$$

При фиксированном γ значения μ ограничены сверху и снизу. Пусть Λ и λ есть соответственно наибольшее и наименьшее значения μ при заданном γ :

$$\widehat{J}_+\psi_{\gamma\Lambda} = 0, \quad \widehat{J}_-\psi_{\gamma\lambda} = 0.$$

Используя операторные равенства

$$\widehat{J}_-\widehat{J}_+ = \widehat{J}^2 - \widehat{J}_z^2 - \widehat{J}_z, \quad (4.12)$$

$$\widehat{J}_+\widehat{J}_- = \widehat{J}^2 - \widehat{J}_z^2 + \widehat{J}_z, \quad (4.13)$$

действуя (4.12) на $\psi_{\gamma\Lambda}$ и (4.13) на $\psi_{\gamma\lambda}$, получаем

$$\begin{aligned} \gamma - \Lambda^2 - \Lambda &= 0, & \gamma - \lambda^2 - \lambda &= 0, \\ (\Lambda - \lambda + 1)(\Lambda + \lambda) &= 0. \end{aligned}$$

Так как по условию $\Lambda \geq \lambda$, то

$$\Lambda = -\lambda = J.$$

Отсюда получаем

$$\gamma = J(J + 1).$$

При заданном γ проекция момента μ принимает $2J + 1$ отличающихся на единицу значений: от J до $-J$. Поэтому разность

$$\Lambda - \lambda = 2J$$

должна быть целым числом.

Таким образом, собственные значения проекции момента J_z (мы будем обозначать их буквой M) суть целые,

$$M = k \quad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots),$$

или полуцелые,

$$M = k + 1/2 \quad (k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots),$$

числа. Заметим, что состояние с заданным $\gamma = J(J + 1)$ вырождено с кратностью $2J + 1$ по значениям проекции момента M . Это есть частный случай установленного в п. 1.18 правила: операторы \widehat{J}_i и \widehat{J}_k коммутируют с \widehat{J}^2 , но не коммутируют между собой. Под

«состоянием с моментом J » мы будем понимать состояние с $\gamma = J(J + 1)$, в котором максимальное значение проекции момента есть J . Такие состояния будем обозначать $\psi_{J,M}$ или $|JM\rangle$.

5. Найдем матричные элементы операторов \hat{J}_x, \hat{J}_y в представлении, в котором \hat{J}^2 и \hat{J}_z диагональны. Из (4.11) и (4.12) имеем

$$\begin{aligned} \hat{J}_- \hat{J}_+ \psi_{J,M-1} &= \alpha_M \hat{J}_- \psi_{J,M} = \alpha_M^2 \psi_{J,M-1}, \\ J(J+1) - (M-1)^2 - (M-1) &= \alpha_M^2, \\ \alpha_M &= \sqrt{(J+M)(J-M+1)}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Подставляя (4.14) в (4.11) получаем

$$\hat{J}_+ \psi_{J,M-1} = \sqrt{(J+M)(J-M+1)} \psi_{J,M}.$$

Следовательно, матричный элемент оператора \hat{J}_+ есть

$$\langle JN | \hat{J}_+ | J, M-1 \rangle = \sqrt{(J+M)(J-M+1)} \delta_{N,M}.$$

Аналогично

$$\langle JN | \hat{J}_- | J, M \rangle = \sqrt{(J+M)(J-M+1)} \delta_{N,M-1}.$$

Используя определения операторов \hat{J}_+, \hat{J}_- , находим

$$\begin{aligned} \langle JM | \hat{J}_x | J, M-1 \rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{(J+M)(J-M+1)}, \\ \langle JM | \hat{J}_y | J, M-1 \rangle &= -\frac{i}{2} \sqrt{(J+M)(J-M+1)}. \end{aligned}$$

6. Из коммутационных соотношений (4.8) следует, в частности,

$$[\hat{l}_i, \hat{p}_k] = i \varepsilon_{ikl} \hat{p}_l.$$

Таким образом, существуют общие СФ операторов \hat{l}_z — проекции момента на ось z и \hat{p}_z — проекции импульса на ось z . Гамильтониан свободного движения

$$\hat{H}_0 = \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}}{\sqrt{2m}} \right)^2$$

может быть представлен как квадрат векторного оператора. Поэтому существуют общие СФ операторов \hat{H}_0, \hat{l}^2 и \hat{l}_z . Свободная частица может находиться в состоянии с определенными значениями E, l, m . Через m мы здесь и всюду в дальнейшем будем обозначать проекцию орбитального момента на ось z .

Рассмотрим оператор орбитального момента одной частицы в сферических координатах r, θ, φ :

$$z = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad x = r \sin \theta \cos \varphi. \quad (4.15)$$

Пусть $\Phi(r, \theta, \varphi)$ — ВФ частицы в системе Σ ; $\Phi'(r, \theta, \varphi)$ — ВФ частицы в системе Σ' . При повороте системы координат на бесконечно малый угол вокруг оси z

$$\Phi'(r, \theta, \varphi) = \Phi(r, \theta, \varphi + \delta\alpha) = \Phi + \delta\alpha \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi},$$

$$\Phi'(r, \theta, \varphi) = \left(1 + i\hat{l}_z \delta\alpha\right) \Phi(r, \theta, \varphi).$$

Из сравнения правых частей этих равенств следует:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} = i\hat{l}_z \Phi, \quad \hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (4.16)$$

При повороте системы координат на бесконечно малый угол вокруг оси x

$$\Phi'(r, \theta, \varphi) = \Phi + \delta\alpha \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial \alpha} + \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial \alpha} \right), \quad (4.17)$$

$$\Phi'(r, \theta, \varphi) = \left(1 + i\hat{l}_x \delta\alpha\right) \Phi(r, \theta, \varphi). \quad (4.18)$$

Так как при таком повороте

$$z' = z + y\delta\alpha, \quad y' = y - z\delta\alpha, \quad x' = x,$$

то из формул (4.15) получаем

$$r \cos(\theta + d\theta) = r \cos \theta + r \sin \theta \sin \varphi \delta\alpha, \quad (4.19)$$

$$r \sin \varphi \sin(\theta + d\theta) = r \sin \theta \sin \varphi - r \cos \theta \delta\alpha. \quad (4.20)$$

Первое из этих соотношений дает

$$\begin{aligned} -\sin \theta d\theta &= \sin \theta \sin \varphi \delta\alpha, \\ \frac{d\theta}{d\alpha} &= -\sin \varphi. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Из соотношения (4.20) получаем

$$\cos \theta \sin \varphi d\theta + \sin \theta \cos \varphi d\varphi = -\cos \theta \delta\alpha,$$

$$\cos \varphi \sin \theta \frac{d\varphi}{d\alpha} = -\cos \theta - \cos \theta \sin \varphi \frac{d\theta}{d\alpha}.$$

Подставляя сюда (4.21), имеем

$$\frac{d\varphi}{d\alpha} = -\operatorname{ctg} \theta \cos \varphi. \quad (4.22)$$

Подставляя (4.21) и (4.22) в (4.17) и сравнивая правые части (4.17) и (4.18), находим

$$\hat{l}_x = i \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right).$$

Рассматривая поворот вокруг оси y , получаем

$$\hat{l}_y = i \left(-\cos \varphi \frac{\partial}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right).$$

Отсюда находим и явный вид операторов \hat{l}_{\pm}, \hat{l}^2 :

$$\begin{aligned}\hat{l}_{\pm} &= \exp(\pm i\varphi) \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{l}^2 &= \hat{l}_- \hat{l}_+ + \hat{l}_z^2 + \hat{l}_z = - \left[\frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \right].\end{aligned}\quad (4.23)$$

Последний оператор с точностью до множителя есть угловая часть оператора Лапласа.

7. Рассмотрим СФ оператора проекции орбитального момента. Из (4.16) получаем

$$\hat{l}_z \Phi = m \Phi = -i \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi},$$

откуда

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi}, \quad (4.24)$$

где значения m , в силу коммутационных соотношений, могут быть как целыми, так и полуцелыми. Потребуем эрмитовости оператора \hat{l}_z :

$$\int_0^{2\pi} f^* \hat{l}_z g d\varphi = \left(\int_0^{2\pi} g^* \hat{l}_z f d\varphi \right)^* + f^* g(2\pi) - f^* g(0).$$

Таким образом, оператор \hat{l}_z будет эрмитов на классе функций, удовлетворяющих условию

$$f^* g(2\pi) = f^* g(0). \quad (4.25)$$

СФ \hat{l}_z принадлежат классу $L^2(0, 2\pi)$ и удовлетворяют условию эрмитовости (4.25). Этому условию удовлетворяют также любые дифференцируемые ВФ, разложимые по $\Phi_m(\varphi)$:

$$\begin{aligned}F(\varphi) &= \sum_k a_k e^{ik\varphi}, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots; \\ G(\varphi) &= \sum_k b_k e^{ik\varphi}, \quad k = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots,\end{aligned}$$

только с целыми или только с полуцелыми значениями m , но не комбинации функций F и G . Выбор возможных значений m делается на основе сравнения с экспериментом. Величина проекции орбитального момента может принимать только целочисленное значение (в единицах \hbar).

Рассмотрим общие СФ операторов \hat{l}_z и \hat{l}^2 . Из (4.14) следует:

$$\begin{aligned}\hat{l}_- \psi_{lm} &= \sqrt{(l+m)(l-m+1)} \psi_{l, m-1}, \\ \hat{l}_- \psi_{ll} &= \sqrt{2l} \psi_{l, l-1}.\end{aligned}$$

По индукции можно показать, что

$$(\widehat{l}_-)^k \psi_{ll} = \sqrt{\frac{k! (2l)!}{(2l-k)!}} \psi_{l, l-k}.$$

Полагая $l - k = m$, получаем

$$\psi_{lm} = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)! (2l)!}} (\widehat{l}_-)^{l-m} \psi_{ll}. \quad (4.26)$$

По определению

$$\widehat{l}_+ \psi_{ll} = 0.$$

Используя (4.23), подстановкой

$$\psi_{ll} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il\varphi} \Theta_{ll}(\theta)$$

получаем уравнение

$$\frac{d\Theta_{ll}}{d\theta} = l \operatorname{ctg} \theta \cdot \Theta_{ll}.$$

Отсюда

$$\Theta_{ll} = A \sin^l \theta.$$

Определяя постоянную A из условий нормировки, получаем

$$\Theta_{ll} = (-i)^l \sqrt{\frac{(2l+1)!}{2} \frac{1}{2^l l!}} \sin^l \theta. \quad (4.27)$$

Формулы (4.24), (4.26) и (4.27) полностью определяют вид собственных функций оператора \widehat{l}^2 — сферических функций

$$Y_{lm} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} (-1)^m i^l \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta), \quad (4.28)$$

где $P_l^m(\cos \theta)$ — присоединенные полиномы Лежандра:

$$P_l^m(\cos \theta) = \frac{1}{2^l l!} \sin^m \theta \frac{d^{m+l}}{(d \cos \theta)^{m+l}} (\cos^2 \theta - 1)^l.$$

Мы будем использовать также обозначение $\Pi_l^m(\cos \theta)$ для нормированных присоединенных полиномов Лежандра:

$$\Pi_l^m(\cos \theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta).$$

8. Оператор инверсии \widehat{P} , введенный в п. 1.2 для одномерного случая, меняет знак всех координат:

$$\widehat{P}\varphi(x, y, z) = \varphi(-x, -y, -z).$$

При инверсии правая и левая системы координат переходят друг в друга. Определенный таким образом оператор \widehat{P} эрмитов и унитарен.

В силу равенства

$$\widehat{P}^2 = \widehat{I}$$

СЗ оператора инверсии равны ± 1 . СФ оператора \widehat{P} называются четными при $P = 1$ и нечетными при $P = -1$. В нерелятивистской квантовой механике гамильтониан замкнутой системы при дискретном унитарном преобразовании инверсии остается инвариантным:

$$\widehat{P}\widehat{H}\widehat{P} = \widehat{P}^{-1}\widehat{H}\widehat{P} = \widehat{H}.$$

Поэтому гамильтониан коммутирует с преобразованием инверсии. Следовательно, четность состояния является интегралом движения.

Оператор инверсии \widehat{P} коммутирует и с каждой компонентой оператора орбитального момента

$$[\widehat{P}, \widehat{l}_i] = 0.$$

Следовательно,

$$[\widehat{P}, \widehat{l}_{\pm}] = 0.$$

Пусть ψ — общая СФ операторов \widehat{P} , \widehat{l}^2 и \widehat{l}_z . Тогда из последнего равенства вытекает, что четности состояний, отличающихся только значением проекции орбитального момента, совпадают.

Определим четность состояния одной частицы с моментом l :

$$\widehat{P}\psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \pi - \theta, \pi + \varphi).$$

Зависимость ВФ от углов определяется СФ момента (4.28):

$$\psi = P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi},$$

$$\widehat{P}\psi = P_l^m(-\cos \theta) e^{im\pi} e^{im\varphi} = (-1)^{l-m} P_l^m(\cos \theta) (-1)^m e^{im\varphi}.$$

Таким образом, четность состояния частицы

$$P = (-1)^l \quad (4.29)$$

совпадает с четностью значения ее орбитального момента.

9. Некоторые частицы, кроме орбитального момента, обладают собственным моментом — *спиновым моментом* или *спином* \widehat{s} , не связанным с движением в пространстве. Коммутационные соотношения, выведенные из рассмотрения бесконечно малых поворотов системы координат, справедливы и для векторного оператора спина:

$$[\widehat{s}_i, \widehat{s}_j] = \varepsilon_{ijk} \widehat{s}_k. \quad (4.30)$$

Сохраняются для спина и все формулы, полученные в пп. 4.4, 4.5: для их вывода использовались только коммутационные соотношения.

Спектр проекций спина есть последовательность целых или полуцелых чисел, отличающихся на единицу. Собственные значения квадрата спина суть

$$\widehat{s}^2 \psi_s = s(s+1) \psi_s.$$

При заданном s компонента s_z может принимать $2s + 1$ значений от $-s$ до $+s$.

ВФ частицы со спином зависит не только от непрерывных переменных \mathbf{r} (или \mathbf{p}), но и от дискретной спиновой переменной σ , указывающей значение проекции спина на выбранную ось z . ВФ частицы со спином $\Psi(\mathbf{r}, \sigma)$ можно разложить по СФ с заданной величиной проекции спина:

$$\Psi(\mathbf{r}, \sigma) = \sum_{\sigma=-s}^s \psi_{\sigma}(\mathbf{r})\chi(\sigma).$$

Спиновые ВФ $\chi(\sigma_i)$ ортогональны при $\sigma_i \neq \sigma_k$. Функции $\psi_{\sigma}(\mathbf{r})\chi(\sigma)$ называют компонентами ВФ частицы со спином, функцию $\psi_{\sigma}(\mathbf{r})$ называют орбитальной ВФ или просто орбиталью. ВФ частицы нормирована условием

$$\sum_{\sigma=-s}^s \|\psi_{\sigma}(\mathbf{r})\|^2 = 1.$$

10. Коммутационные соотношения (4.30) позволяют определить явный вид операторов спина — матриц, действующих в пространстве СФ оператора проекции спина. Многие элементарные частицы (в том числе электроны и нуклоны) обладают спином $1/2$. Проекция \hat{s} может принимать лишь значения $+1/2$ и $-1/2$ (в единицах \hbar). Матрицы операторов \hat{s}_x , \hat{s}_y , \hat{s}_z в пространстве собственных функций \hat{s}^2 , \hat{s}_z имеют вид

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}, \quad (4.31)$$

$$\hat{s}^2 = \frac{3}{4} \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}. \quad (4.32)$$

Матрицы $\sigma_i = 2s_i$ называют *матрицами Паули*. Их свойства рассматривались в задачах к гл. 1. В частности,

$$\sigma_i^2 = \hat{I}^2, \quad \sigma_i \sigma_k = -\sigma_k \sigma_i. \quad (4.33)$$

Пусть сферически-симметричные ВФ частицы $\psi_1 = \psi(r, +1/2)$ и $\psi_2 = \psi(r, -1/2)$ различаются лишь значениями проекций спина. Значения вероятностей проекций спина определяются квадратами норм этих функций $\|\psi_{1,2}\|^2$. Очевидно,

$$\|\psi_1\|^2 + \|\psi_2\|^2 = 1.$$

Так как собственными функциями \hat{s}_z являются двухкомпонентные величины

$$\chi_1 = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad \chi_2 = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix},$$

то ВФ частицы со спином 1/2 можно представить в виде

$$\Psi = \psi_1 \chi_1 + \psi_2 \chi_2 = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix}.$$

В дальнейшем мы не будем рассматривать зависимость Ψ от координат и заменим ψ_1 и ψ_2 числами.

Рассмотрим преобразование компонент ВФ частицы при переходе к повернутой системе координат. Пусть Ψ есть ВФ системы в некоторой декартовой системе Σ . Найдем вероятности значений проекции спина на некоторое направление в пространстве, которое примем за ось z' в системе Σ' .

Мы имеем два различных подхода к решению этой задачи. Во-первых, можно предположить, что компоненты спиновой функции Ψ не меняются при переходе от Σ к Σ' , а оператор \hat{s} меняется как вектор. В этом случае для того, чтобы определить вероятности значений проекции спина на ось z' в системе Σ' , надо найти нормированные СФ оператора \hat{s}'_z и разложить Ψ по этим СФ. Квадраты модулей коэффициентов в разложении и дадут искомые вероятности. Найдем унитарный оператор $\hat{U}^+(\varphi)$ для поворота на угол φ относительно оси z . В принятом представлении имеем

$$\begin{aligned} \hat{s}'_x &= \hat{s}_x \cos \varphi + \hat{s}_y \sin \varphi = e^{-i\hat{L}\varphi} \hat{s}_x e^{i\hat{L}\varphi}, \\ \hat{s}'_y &= -\hat{s}_x \sin \varphi + \hat{s}_y \cos \varphi = e^{-i\hat{L}\varphi} \hat{s}_y e^{i\hat{L}\varphi}, \\ \hat{s}'_z &= \hat{s}_z = e^{-i\hat{L}\varphi} \hat{s}_z e^{i\hat{L}\varphi}. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Рассматривая бесконечно малый поворот и учитывая коммутационные соотношения (4.30), найдем, что $\hat{L} = \hat{s}_z$.

Можно перейти к другому представлению. Потребуем, чтобы при переходе от Σ к Σ' вид операторов \hat{s}_i оставался неизменным, а компоненты спиновой функции изменялись. Переход к этому представлению есть унитарное преобразование

$$\hat{V}^+ \hat{s}' \hat{V} = \hat{s}, \quad (4.35)$$

$$\begin{vmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \end{vmatrix} = \hat{V}^+ \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix}. \quad (4.36)$$

Из (4.34), (4.35) имеем

$$\hat{V}^+ e^{-i\hat{s}_z \varphi} \hat{s} e^{i\hat{s}_z \varphi} \hat{V} = \hat{s}, \quad \hat{V}^+ = e^{i\hat{s}_z \varphi}.$$

Используя последнее равенство и формулу (4.36), получаем

$$\begin{vmatrix} \psi'_1 \\ \psi'_2 \end{vmatrix} = e^{i\hat{s}_z \varphi} \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix}.$$

Оператор поворота $\hat{V}^+_z(\varphi)$ можно найти и в явном виде, используя

явный вид оператора \hat{s}_z и свойство матриц Паули (4.33):

$$\hat{V}_z^+(\varphi) = \begin{vmatrix} e^{i\varphi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\varphi/2} \end{vmatrix}.$$

11. Произвольная система координат Σ' может быть получена из Σ последовательными поворотами на угол φ вокруг оси z , на угол θ вокруг нового положения оси x и на угол ψ вокруг нового положения оси z (рис. 12).

Параметры φ , θ , ψ ¹ называются *углами Эйлера*. Поскольку вид операторов \hat{s}_i в выбранном представлении одинаков во всех системах координат, матрицу преобразования можно найти простым последовательным перемножением матриц:

$$\hat{V}^+(\varphi, \theta, \psi) = \hat{V}_z^+(\psi) \hat{V}_x^+(\theta) \hat{V}_z^+(\varphi).$$

Явный вид матрицы $\hat{V}_x^+(\theta)$ легко найти:

$$\hat{V}_x^+(\theta) = \begin{vmatrix} \cos(\theta/2) & i \sin(\theta/2) \\ i \sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{vmatrix}.$$

Результирующая матрица имеет вид

$$\hat{V}^+(\varphi, \theta, \psi) = \begin{vmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \cdot e^{i \frac{\varphi+\psi}{2}} & i \sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{i \frac{\psi-\varphi}{2}} \\ i \sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{i \frac{\varphi-\psi}{2}} & \cos \frac{\theta}{2} \cdot e^{-i \frac{\varphi+\psi}{2}} \end{vmatrix}. \quad (4.37)$$

Таким образом, при произвольном повороте системы координат

$$\psi'_1 = \psi_1 \cos \frac{\theta}{2} \cdot e^{i \frac{\varphi+\psi}{2}} + i \psi_2 \sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{i \frac{\psi-\varphi}{2}},$$

$$\psi'_2 = i \psi_1 \sin \frac{\theta}{2} \cdot e^{i \frac{\varphi-\psi}{2}} + \psi_2 \cos \frac{\theta}{2} \cdot e^{-i \frac{\varphi+\psi}{2}}.$$

Повороту системы координат в трехмерном пространстве соответствует линейное преобразование в пространстве E_2 двухкомпонентных волновых функций. При преобразовании (4.37) остается инвариантной величина

$$\{\varphi, \psi\} = \psi_1 \varphi_2 - \psi_2 \varphi_1. \quad (4.38)$$

Линейные преобразования, оставляющие инвариантной такую билинейную форму, называются бинарными. Двухкомпонентная величина, для которой поворот системы координат есть бинарное преобразование называется спинором первого ранга или просто спинором.

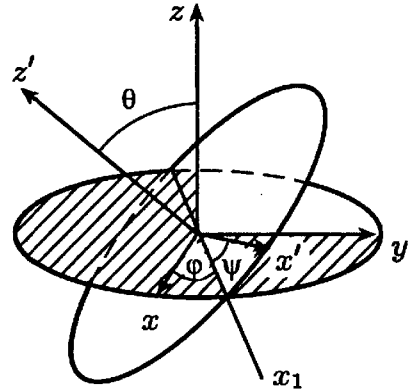


Рис. 12

¹ Обозначение ψ для угла не смешивать с обозначением волновой функции.

12. Рассмотрим спиновую ВФ системы двух частиц со спином $1/2$. Общие СФ операторов $i\hat{s}^2$ и $i\hat{s}_z$ (индекс $i = 1, 2$ нумерует частицы) имеют вид

$$i|+\rangle = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}_i, \quad i|-\rangle = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}_i.$$

Введенные обозначения для СФ оператора проекции \hat{s}_z частицы со спином $1/2$ мы будем использовать в дальнейшем. Для описания системы двух частиц удобно использовать СФ оператора полного спина \hat{S} , определенного соотношением

$$\hat{S} = {}_1\hat{s} + {}_2\hat{s}.$$

Найдем нормированные общие СФ операторов \hat{S}^2 и \hat{S}_z . Мы будем обозначать их как $|S, \sigma\rangle$. Очевидно, такие функции будут линейными комбинациями произведений СФ операторов $i\hat{s}^2$ и $i\hat{s}_z$:

$$\begin{aligned} |++\rangle &= \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}_1 \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}_2, & |+-\rangle &= \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}_1 \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}_2, \\ | -+\rangle &= \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}_1 \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}_2, & |--\rangle &= \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}_1 \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}_2. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Функции (4.39) ортонормированы. В состоянии $|++\rangle$ $S_z = 1$. Это состояние описывается СФ оператора

$$\hat{S}^2 = {}_1\hat{s}^2 + 2{}_1\hat{s}_2\hat{s} + {}_2\hat{s}^2.$$

Докажем это:

$$\hat{S}^2|++\rangle = \frac{3}{2}|++\rangle + 2({}_1\hat{s}_x \cdot {}_2\hat{s}_x + {}_1\hat{s}_y \cdot {}_2\hat{s}_y + {}_1\hat{s}_z \cdot {}_2\hat{s}_z)|++\rangle.$$

Во втором слагаемом в правой части отличный от нуля вклад дает лишь оператор ${}_1\hat{s}_z \cdot {}_2\hat{s}_z$, что легко проверить непосредственным вычислением. Итак,

$$\hat{S}^2|++\rangle = 2|++\rangle = 1(1+1)|++\rangle.$$

Состояние $|++\rangle$ есть состояние с $S = 1$ и $\sigma = 1$. (Выше оно обозначалось как $|1, 1\rangle$.) Введем оператор

$$\hat{S}_- = {}_1\hat{s}_- + {}_2\hat{s}_-.$$

Поскольку $[\hat{S}_-, \hat{S}^2] = 0$, состояния $(\hat{S}_-)^k |1, 1\rangle$ также будут описываться СФ оператора \hat{S}^2 :

$$\hat{S}_-|1, 1\rangle = \hat{S}_-|++\rangle = \sqrt{2}|+-\rangle + \sqrt{2}| -+\rangle;$$

в этом состоянии $\hat{S}_z = 0$; из условия нормировки

$$|1, 0\rangle = \frac{|+-\rangle + | -+\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Далее,

$$\hat{S}_-|1, 0\rangle = |--\rangle + |--\rangle = \alpha|1, -1\rangle.$$

Нормируя, получаем

$$|1, -1\rangle = |--\rangle.$$

Существует еще одна линейно независимая от $|1, 1\rangle$, $|1, 0\rangle$ и $|1, -1\rangle$ комбинация функций (4.39). Ее можно найти из условий ортонормированности:

$$\psi_4 = \frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (4.40)$$

Легко убедиться в выполнении равенств

$$S_z\psi_4 = 0, \quad \hat{S}^2\psi_4 = 0.$$

Следовательно, функция $\psi_4|0, 0\rangle$ описывает состояние системы с полным спином, равным нулю. Состояние системы двух частиц со спином $1/2$ и с полным спином $S = 0$ называется *синглетным*, а трехкратно вырожденное по значению проекции S_z состояние с $S = 1$ называется *триплетным*. Из (4.38) следует, что ВФ состояния с $S = 0$ остается инвариантной при поворотах осей, т. е. является скаляром.

13. Полный момент частицы $\hat{\mathbf{j}}$ складывается из ее орбитального и спинового моментов:

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}.$$

Поскольку операторы $\hat{\mathbf{l}}$ и $\hat{\mathbf{s}}$ действуют в разных пространствах, они коммутируют. Поэтому выполняются соотношения

$$[\hat{j}_i, \hat{j}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{j}_k, \quad [\hat{j}_i, \hat{l}^2] = 0, \quad [\hat{j}_i, \hat{s}^2] = 0. \quad (4.41)$$

Из (4.41) следует, что существуют общие СФ операторов \hat{j}^2 , \hat{j}_z , \hat{l}^2 . Найдем спектр проекций полного момента для частицы со спином $s = 1/2$. Рассмотрим состояние с максимальной проекцией полного момента

$$\bar{\psi} = \psi_u \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} = |l, l, +\rangle, \quad (4.42)$$

$$\hat{j}_z\bar{\psi} = (l + 1/2)\bar{\psi}, \quad j = l + 1/2.$$

Введем оператор

$$\hat{j}_- = \hat{l}_- + \hat{s}_- = \hat{l}_- + \begin{vmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}. \quad (4.43)$$

Учитывая (4.14), получаем

$$\hat{j}_-\psi_u \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix} = \sqrt{2l} |l, l - 1, +\rangle + |l, l, -\rangle.$$

Значение проекции полного момента в этом состоянии

$$j_z = (l - 1) + 1/2 = l - 1/2.$$

Итак, оператор \hat{j}_- уменьшает на единицу значения проекции полного момента. В общем случае

$$\hat{j}_-^k = \hat{l}_-^k + k\hat{l}_-^{k-1}\hat{s}_-.$$

Эта формула получается из разложения бинома, если учесть (см. (4.43)), что \hat{s}_-^2 и все высшие степени \hat{s}_- тождественно равны нулю:

$$\hat{j}_-^k |l, l, +\rangle = \hat{l}_-^k |l, l, +\rangle + k\hat{l}_-^{k-1} |l, l, -\rangle.$$

Подставляя выражение для (\hat{l}_-^k) , найденное в п. 4.7, находим

$$\hat{j}_-^k |l, l, +\rangle = \sqrt{\frac{(2l)! k!}{(2l-k)!}} |l, l-k, +\rangle + \sqrt{\frac{(2l)! (k-1)!}{(2l-k+1)!}} k |l, l-k+1, -\rangle.$$

Вводя $m = l - k$, получаем окончательно

$$\begin{aligned} \hat{j}_-^{l-m} |l, l, +\rangle &= \sqrt{\frac{(2l)! (l-m)!}{(l+m)!}} |l, m, +\rangle + \\ &+ \sqrt{\frac{(2l)! (l-m-1)!}{(l+m+1)!}} (l-m) |l, m+1, -\rangle. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Собственные значения проекции полного момента есть последовательность чисел, отличающихся на единицу, от $j = l - 1/2$ до $j = l + 1/2$. Все построенные таким образом состояния принадлежат тому же СЗ \hat{j}^2 , что и $|l, l, +\rangle$, поскольку $[\hat{j}_-, \hat{j}^2] = 0$:

$$\begin{aligned} \hat{j}^2 |l, l, +\rangle &= (\hat{l}^2 + 2\hat{l}\hat{s} + \hat{s}^2) |l, l, +\rangle = \\ &= \left[l(l+1) + 2l \cdot \frac{1}{2} + \frac{3}{4} \right] |l, l, +\rangle, \end{aligned} \quad (4.45)$$

$$j(j+1) = (l+1/2)(1+3/2).$$

В правой части (4.45) отличный от нуля вклад дает только член $2\hat{l}_z\hat{s}_z$. Таким образом, полученные ВФ соответствуют значениям $j = l + 1/2$, $m_j = m + 1/2$. Нормированные ВФ имеют вид

$$\Phi \left| l + \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{l+m+1}{2l+1}} |l, m, +\rangle + \sqrt{\frac{l-m}{2l+1}} |l, m+1, -\rangle. \quad (4.46)$$

Полное число линейно независимых состояний $N = (2l+1)(2s+1) = 4l+2$. Построенная система ВФ включает $(2j+1) = 2l+3$

состояний. ВФ остальных $2l - 1$ состояний можно получить из условия ортонормированности

$$\left| l - \frac{1}{2}, m + \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{l - m}{2l + 1}} |l, m, +\rangle - \sqrt{\frac{l + m + 1}{2l + 1}} |l, m + 1, -\rangle.$$

14. Если две подсистемы взаимодействуют таким образом, что момент \hat{j}_i каждой из них сохраняется, то СФ оператора полного момента

$$\hat{J} = \hat{j}_1 + \hat{j}_2$$

можно найти, как и в предыдущем пункте. Для фиксированных значений j_1 и j_2 имеется $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ ортонормированных СФ проекции полного момента \hat{J}_z . Функцию, соответствующую максимальному значению проекции полного момента,

$$M_J = j_1 + j_2$$

можно построить единственным образом. Следовательно, $J = j_1 + j_2$ есть максимальное значение полного момента системы. Применяя к функции

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2, j_1, j_2\rangle = |j_1, j_1\rangle \cdot |j_2, j_2\rangle$$

повторно оператор

$$\hat{J}_- = \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-},$$

получаем все $2(j_1 + j_2) + 1$ ортогональных функций, принадлежащих СЗ $J = j_1 + j_2$ с различными M :

$$-(j_1 + j_2) \leq M \leq j_1 + j_2.$$

Так, функция, соответствующая значению $M = j_1 + j_2 - 1$, есть

$$\begin{aligned} |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1, j_2\rangle = \\ = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1, j_2, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1, j_2, j_2 - 1\rangle. \end{aligned}$$

Из условия ортонормированности легко получить функцию, соответствующую $J = j_1 + j_2 - 1$, $M = j_1 + j_2 - 1$:

$$\begin{aligned} |j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1, j_1, j_2\rangle = \\ = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1, j_2, j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1, j_2, j_2 - 1\rangle. \end{aligned}$$

Применяя к полученной функции несколько раз оператор \hat{J}_- , получим $2(j_1 + j_2 - 1) - 1$ функций, принадлежащих $J = j_1 + j_2 - 1$. Повторяя эту процедуру, можно построить все интересующие нас функции.

Легко проверить, что J может принимать значение

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2.$$

В самом деле,

$$\sum_{\min J}^{\max J} (2J + 1) = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1).$$

Таким образом,

$$|J, M, j_1, j_2\rangle = \sum_{m_1+m_2=M} (j_1 m_1 j_2 m_2 | JM) |j_1, m_1, j_2, m_2\rangle.$$

Коэффициенты $(j_1 m_1 j_2 m_2 | JM)$, определяющие вклад различных функций $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$ в СФ операторов \hat{J}^2, \hat{J}_z с СЗ $J(J+1), M$, называются коэффициентами векторного сложения или *коэффициентами Клебша–Гордана*.

ЗАДАЧИ

1. Найти СЗ оператора \hat{J}^2 в состоянии с $\max M = J$, учитывая соотношение

$$\text{Sp } \hat{J}_x^2 = \text{Sp } \hat{J}_y^2 = \text{Sp } \hat{J}_z^2.$$

2. Пусть \hat{A} — векторный оператор, удовлетворяющий соотношению

$$[\hat{J}_i, \hat{A}_k] = i\epsilon_{ikl} \hat{A}_l.$$

Доказать тождества

$$\begin{aligned} [\hat{J}^2, \hat{A}] &= i \left([\hat{A} \times \hat{J}] - [\hat{J} \times \hat{A}] \right), \\ [\hat{J}^2, [\hat{J}^2, \hat{A}]] &= 2 \left(\hat{J}^2 \hat{A} + \hat{A} \hat{J}^2 \right) - 4\hat{J} (\hat{J} \hat{A}). \end{aligned}$$

3. Доказать, что матричные элементы вектора \hat{A} между функциями с одним и тем же значением J пропорциональны соответствующим матричным элементам оператора \hat{J} :

$$\langle n' J M' | \hat{A} | n J M \rangle = K(n n' J) \langle J M' | \hat{J} | J M \rangle.$$

4. Доказать равенство

$$\langle n' J M' | \hat{A} \hat{J} | n J M \rangle = K(n n' J) J(J+1) \delta_{M M'}.$$

5. Найти коммутационные соотношения $[\hat{J}_z, \hat{A}_{ik}]$, где \hat{A}_{ik} — компоненты антисимметричного тензора.

6. Найти коммутационные соотношения $[\hat{J}_z, \hat{B}_{ik}]$, где \hat{B}_{ik} — компоненты симметричного тензора.

7. Найти спектр оператора $\hat{J}_1 \hat{J}_2$.

8. Найти ВФ свободного движения — общие СФ операторов \hat{H}, \hat{p}_z и \hat{l}_z .

9. Найти явный вид матриц \hat{J}_i и унитарных операторов $\hat{U}_i^+(\varphi)$ для $J = 1$.

10. Доказать, что для оператора скалярной величины \hat{L} отличны от нуля только матричные элементы между функциями одинаковой четности.

11. Наиболее общий вид спиновой функции частицы со спином $1/2$ в \hat{s} -представлении есть

$$\psi = e^{i\alpha} \cos \beta |+\rangle + e^{-i\gamma} \sin \beta |-\rangle.$$

Найти сферические координаты φ , θ такого направления в пространстве, проекция спина на которое с достоверностью есть $+1/2$. Такое направление называют направлением поляризации частицы со спином $1/2$.

12. Для операторов \hat{s}_1 , \hat{s}_2 спина двух частиц со спином $1/2$ найти спектр и матричные элементы оператора $\hat{s}_1 \hat{s}_2$.

13. Доказать, что функция $|j_1, j_1, j_2, j_2\rangle$ есть СФ операторов \hat{J}^2 и J_z , соответствующая значению $J = j_1 + j_2$.

14. Найти нормированные общие СФ операторов \hat{J}^2 , J_z системы двух частиц $j_1 = 1$, $j_2 = j$.

15. Найти нормированные СФ операторов полного спина \hat{S}^2 и \hat{S}_z системы трех частиц со спином $1/2$. Отметим отличие от случая, рассмотренного в п. 4.12: величина полного спина не определяет однозначно спиновых ВФ.

16. Доказать равенство

$$e^{-i\hat{L}_x\theta} \hat{L}_z e^{i\hat{L}_x\theta} = \hat{L}_z \cos \theta + \hat{L}_y \sin \theta.$$

17. Показать, что операторы \hat{j}_+ , \hat{j}_- можно представить в виде

$$\hat{j}_- = \sqrt{2j - \hat{a}^+ \hat{a}} \hat{a}, \quad \hat{j}_+ = \hat{a}^+ \sqrt{2j - \hat{a}^+ \hat{a}},$$

где \hat{a}^+ , \hat{a} — операторы Бозе (см. задачи к гл. 1). Найти вид \hat{j}_z в этом представлении ($n \leq 2j$).

18. Пусть \hat{a} и \hat{b} — операторы Бозе:

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1, \quad [\hat{b}, \hat{b}^+] = 1, \quad [\hat{a}, \hat{b}] = [\hat{a}, \hat{b}^+] = 0.$$

Показать, что можно положить

$$\hat{J}_1 = \frac{\hat{a}^+ \hat{b} + \hat{b}^+ \hat{a}}{2}, \quad \hat{J}_2 = \frac{\hat{a}^+ \hat{b} - \hat{b}^+ \hat{a}}{2i}.$$

Найти вид операторов \hat{J}_3 и \hat{J}^2 в этом представлении.

19. Пусть

$$e^{i\hat{J}_x} e^{i\hat{J}_y} e^{i\hat{J}_z} = e^{i(\alpha\hat{J}_x + \beta\hat{J}_y + \gamma\hat{J}_z)}.$$

Найти параметры α , β и γ .

ЦЕНТРАЛЬНОЕ ПОЛЕ

0. Если взаимодействие двух частиц можно описать потенциалом $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, зависящим только от расстояния между частицами, то задача о движении таких частиц в квантовой механике, как и в классической, сводится к задаче о движении частицы в центрально-симметричном поле.

Лагранжиан системы двух частиц в классической механике имеет вид

$$\mathcal{L} = \frac{m_1 \dot{\mathbf{r}}_1^2}{2} + \frac{m_2 \dot{\mathbf{r}}_2^2}{2} - U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|).$$

Введем вектор взаимного расстояния

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$$

и вектор, определяющий положение центра инерции,

$$\mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}.$$

Тогда

$$\mathcal{L} = \frac{M \dot{\mathbf{R}}^2}{2} + \frac{m \dot{\mathbf{r}}^2}{2} - U(r),$$

где

$$M = m_1 + m_2, \quad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Вводя импульсы с помощью соотношений

$$\mathbf{P} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{R}}} = M \dot{\mathbf{R}}, \quad \mathbf{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m \dot{\mathbf{r}},$$

получим классическую функцию Гамильтона

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} + U(r).$$

Оператор Гамильтона для квантовомеханической задачи получим, заменяя \mathbf{P} и \mathbf{p} операторами с коммутационными соотношениями

$$[P_i, R_k] = -i\hbar \delta_{ik}, \quad [p_i, r_k] = -i\hbar \delta_{ik},$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta_R - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + U(r).$$

Волновую функцию системы можно представить в виде (см. п. 3.0)

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \varphi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r}), \quad (5.1)$$

где $\varphi(\mathbf{R})$ описывает движение центра инерции (свободное движение частицы массы M), а $\psi(\mathbf{r})$ — движение частицы массы m в поле $U(r)$. В дальнейшем мы ограничимся рассмотрением ВФ движения в центральном поле.

1. Уравнение Шредингера для стационарных состояний в центрально-симметричном поле

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi = 0$$

в сферических координатах имеет вид

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \psi = 0. \quad (5.2)$$

Используя выражение (4.23) для оператора \hat{l}^2 , получим

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{\hat{l}^2}{r^2} \psi \right] + U(r) \psi = E \psi.$$

Операторы \hat{l}^2 и \hat{l}_z коммутируют с гамильтонианом \hat{H} , поэтому существуют общие СФ операторов \hat{H} , \hat{l}^2 и \hat{l}_z . Мы будем рассматривать именно такие решения УШ. Это требование определяет зависимость ψ от углов:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

где $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ определяется (4.28). Так как

$$\hat{l}^2 Y_{lm} = l(l+1) Y_{lm},$$

то для радиальной части ВФ $R(r)$ получаем уравнение

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] R = 0. \quad (5.3)$$

Это уравнение не содержит значения проекции момента на ось z $l_z = m$: при заданном l уровень энергии E соответствует $2l + 1$ состояниям, различающимся значениями l_z . Это вырождение является следствием правила: энергетические уровни вырождены при наличии у системы двух сохраняющихся некоммутирующих операторов (см. п. 1.18). Для движения в центральном поле такими операторами являются любые два из трех сохраняющихся операторов компонент момента l_x, l_y, l_z .

Для состояний с различными значениями орбитального момента приняты обозначения:

$$l = 0 \quad 1 \quad 2 \quad 3 \quad 4 \quad (5.4)$$

$$s \quad p \quad d \quad f \quad g$$

Число l — максимальное значение проекции момента — называют *азимутальным*, а m — проекцию момента — *магнитным* квантовыми числами.

2. Приведем эквивалентные формы дифференциального оператора в уравнении (5.3):

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) = \frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (rR).$$

Последнее выражение позволяет придать уравнению (5.3) вид одномерного УШ (3.4); полагая

$$\chi(r) = rR(r),$$

получим

$$\frac{d^2 \chi}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \chi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)] \chi = 0. \quad (5.5)$$

Однако, в отличие от случая движения на неограниченной прямой, для уравнения (5.5) необходимо задать граничное условие при $r = 0$. Рассмотрим вид ВФ при $r \rightarrow 0$ для слабо сингулярных потенциалов:

$$\lim_{r \rightarrow 0} U(r)r^2 = 0.$$

Тогда в (5.5) при малых r наиболее существенны первые два члена. Подставляя $\chi(r) \approx r^\nu$, получаем

$$\nu(\nu - 1) = l(l + 1).$$

Это уравнение имеет корни

$$\nu_1 = l + 1, \quad \nu_2 = -l. \quad (5.6)$$

Требование нормированности ВФ несовместимо со значением $\nu = -l$ при $l \neq 0$, так как будут расходиться нормировочные интегралы

$$\int_0^\infty |\chi_n^2(r)| dr$$

для дискретного спектра и не будет выполняться условие (1.17) для непрерывного спектра. При $l = 0$ граничные условия определяются из требования конечности среднего значения кинетической энергии, которое выполняется лишь при $\nu = 1$. Итак, ВФ частицы в слабо сингулярном потенциале всюду конечна и при любых l

$$\chi(0) = 0. \quad (5.7)$$

3. Решение задачи о движении частицы в центральном поле $U(r)$ сводится к отысканию решений одномерного УШ с *эффективным потенциалом*

$$V_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}$$

и граничным условием (5.7). Второй член в (5.5) называется центробежным потенциалом. В этой главе мы будем рассматривать только состояния дискретного спектра. В гл. 3 мы видели, что для УШ на неограниченной прямой с потенциалом $U(x)$, удовлетворяющим условиям

$$M < U(x) < 0, \quad U_+ = U_- = 0, \quad (5.8)$$

всегда существует по крайней мере одно связанное состояние. Для уравнения (5.5) даже в случае $l = 0$ это не так. Пусть

$$M < U(r) < 0, \quad U_+ = \lim_{r \rightarrow \infty} U(r) = 0. \quad (5.9)$$

Рассмотрим одномерное УШ с потенциалом $U(|x|) = U(r)$. В поле с четным потенциалом ВФ либо четны, либо нечетны: ВФ основного состояния $\psi_0(x)$ не обращается в нуль в силу осцилляционной теоремы, и поэтому функция $\psi_0(r)$ не удовлетворяет условию (5.7). Функция первого возбужденного состояния $\psi_1(x)$ нечетна, так как имеет только один нуль; соответствующее решение $\psi_1(r)$ удовлетворяет условию (5.7). Таким образом, дискретный спектр для радиального УШ (5.5) содержит хотя бы одно значение, если дискретный спектр одномерного УШ с потенциалом $U(|x|) = U(r)$ содержит не менее двух значений. Последнее условие выполняется не всегда.

4. Если монотонный потенциал притяжения $U(r) < 0$ слабо сингулярен при $r = 0$ ($\lim_{r \rightarrow 0} U(r)r^2 = 0$) и убывает при $r \rightarrow \infty$ быстрее, чем r^{-2} , то существует некоторое предельное значение момента Λ такое, что при $l > \Lambda$ связанные состояния отсутствуют (кривая d на рис. 13). Необходимым условием существования дискретного спектра является существование области $r_1 < r < r_2$, в которой $V_l(r) < 0$ (рис. 13, s и p). Будем рассматривать l как непрерывный параметр. С ростом l корни r_1, r_2 уравнения $V_l(r) = 0$ сближаются, переходя при $l = \Lambda_N$ в двукратный корень r_0 . Пусть $U(r) = U_0 f(r/a)$. Тогда в точке r_0 $V_\Lambda(r_0) = 0$, $V'_\Lambda(r_0) = 0$, т. е.

$$U_0 f\left(\frac{r}{a}\right) = \frac{\Lambda(\Lambda + 1)\hbar^2}{2mr_0^2}, \quad (5.10)$$

$$\frac{U_0}{a} f'\left(\frac{r}{a}\right) = -\frac{2\Lambda(\Lambda + 1)\hbar^2}{2mr_0^2}. \quad (5.11)$$

Разделив (5.10) на (5.11), получим уравнение, определяющее $r_0 = ax_0$:

$$f(x_0) = -\frac{x_0}{2} f'(x_0),$$

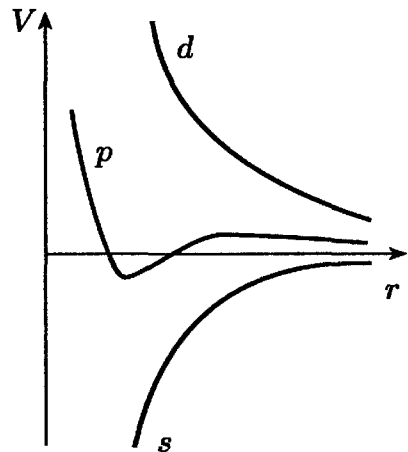


Рис. 13

зависящее только от вида функции $f(x)$. Подставляя это значение в (5.10), получаем

$$\Lambda(\Lambda + 1) \leq \frac{U_0 \cdot 2mr_0^2}{\hbar^2} f(x_0) = B\{x_0^2 f(x_0)\}, \quad (5.12)$$

где B — борновский параметр (3.12). Максимальное значение Λ , совместимое с (5.12), обозначим Λ_N . Величина в фигурных скобках есть безразмерная константа порядка единицы. Таким образом, при $B \gg 1$

$$\Lambda_N \approx \sqrt{B}.$$

5. Рассмотрим энергетический спектр и ВФ связанных состояний для системы двух зарядов. Связанные состояния существуют только в случае притяжения. Такая система описывает свойства атома водорода и водородоподобных ионов (He^+ , Li^{++} и т. д.). Уравнение для радиальной ВФ:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{\alpha}{r} \right) R = 0, \quad (5.13)$$

где константа α , характеризующая потенциал, есть Ze^2 . Здесь e — заряд электрона, а Z — целое число, равное заряду ядра в единицах e . Константы e^2 , m и \hbar позволяют построить величины с размерностью длины

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,529 \cdot 10^{-8} \text{ см},$$

называемую *боровским радиусом*, и времени

$$t_0 = \frac{\hbar^3}{me^4} = 0,242 \cdot 10^{-16} \text{ с}.$$

Эти величины определяют типичные пространственно-временные масштабы для атомных систем, поэтому их удобно использовать в качестве основы системы единиц (так называемые *атомные единицы*).

Уравнение (5.13) имеет в атомных единицах (при $Z = 1$) вид

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + 2 \left(E + \frac{1}{r} \right) R = 0. \quad (5.14)$$

При $E < 0$ движение финитно и энергетический спектр дискретен. Нас интересуют решения (5.14), квадратично интегрируемые с весом r^2 . Введем обозначения:

$$n = \frac{1}{\sqrt{-2E}}, \quad \rho = \frac{2r}{n}.$$

Уравнение принимает вид

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR}{d\rho} + \left[\frac{n}{\rho} - \frac{1}{4} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] R = 0. \quad (5.15)$$

Найдем асимптотики радиальной функции $R(r)$. При $\rho \rightarrow \infty$, опуская в (5.15) члены $\sim \rho^{-1}, \rho^{-2}$, получаем

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} = \frac{R}{4}.$$

Поэтому при больших ρ $R \sim e^{\pm\rho/2}$; требованию нормированности удовлетворяет только $R \sim e^{-\rho/2}$. Асимптотики при $r \rightarrow 0$ были определены в п. 5.2.

Подстановкой

$$R(\rho) = \rho^l e^{-\rho/2} w(\rho) \quad (5.16)$$

уравнение (5.15) сводится к виду*

$$\rho \frac{d^2 w}{d\rho^2} + (2l + 2 - \rho) \frac{dw}{d\rho} + (n - l - 1)w = 0.$$

Решение этого уравнения, конечное при $\rho = 0$, легко найти, подставив $w(\rho)$ в виде степенного ряда

$$w(\rho) = 1 + \frac{0 - \nu}{0 + \lambda} \rho + \frac{(0 - \nu)(1 - \nu)}{(0 + \lambda)(1 + \lambda)} \frac{\rho^2}{2!} + \\ + \frac{(0 - \nu)(1 - \nu)(2 - \nu)}{(0 + \lambda)(1 + \lambda)(2 + \lambda)} \frac{\rho^3}{3!} + \dots, \quad (5.17)$$

где

$$\lambda = 2l + 2, \quad -\nu = -n + l + 1.$$

При $\rho \rightarrow \infty$ функция $w(\rho)$ должна расти не быстрее конечной степени ρ , для этого ν должно быть целым. Тогда $w(\rho)$ будет полиномом степени ν . Итак,

$$-n + l + 1 = -k, \quad n = l + 1 + k \quad (k = 0, 1, 2, \dots) \quad (5.18)$$

при заданном значении l . Отсюда, используя определение n , находим энергетический спектр

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}. \quad (5.19)$$

Число n называется *главным квантовым числом*. В обычных единицах это выражение имеет вид

$$E_n = -Z^2 \frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}. \quad (5.20)$$

Эта формула была получена Бором (1913 г.) на основе старой квантовой теории, Паули (1926 г.) из матричной механики и Шредингером (1926 г.) с помощью решения дифференциального уравнения.

Задача о спектре атома водорода представляет уникальный пример проблемы, допускающей точное решение, прекрасно согласующееся с экспериментом.

6. В классической механике при движении в кулоновском поле притяжения $U(r) = -\alpha/r$ сохраняется вектор Рунге–Ленца.

$$\mathbf{A} = \frac{\mathbf{r}}{r} + \frac{1}{m\alpha} [\mathbf{l}\dot{\mathbf{p}}]. \quad (5.21)$$

Докажем это:

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{1}{m\alpha} [\dot{\mathbf{l}}\dot{\mathbf{p}}] + \frac{\dot{\mathbf{r}}(\mathbf{r}\dot{\mathbf{r}}) - \mathbf{r}(\dot{\mathbf{r}}\dot{\mathbf{r}})}{r^3}.$$

Из уравнений движения находим

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\alpha}{r^3} \mathbf{r}.$$

Используя тождество

$$[\mathbf{r}[\dot{\mathbf{r}}\dot{\mathbf{r}}]] = \dot{\mathbf{r}}(\mathbf{r}\dot{\mathbf{r}}) - \mathbf{r}(\dot{\mathbf{r}}\dot{\mathbf{r}}),$$

получаем

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = -\frac{[\mathbf{l}\dot{\mathbf{r}}]}{mr^3} + \frac{[\mathbf{r}[m\dot{\mathbf{r}}, \mathbf{r}]]}{mr^3} = 0. \quad (5.22)$$

В квантовой механике вектору \mathbf{A} сопоставляется оператор

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{\mathbf{r}}{r} + \frac{1}{2} \left\{ [\hat{\mathbf{l}}\hat{\mathbf{p}}] - [\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{l}}] \right\}. \quad (5.23)$$

Мы положили $Z = 1$ и использовали атомные единицы. Оператор $\hat{\mathbf{A}}$ коммутирует с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} - \frac{1}{r}.$$

Компоненты \hat{A}_i связаны коммутационными соотношениями

$$[\hat{A}_i, \hat{A}_j] = -i\epsilon_{ijk} \hat{l}_k \cdot 2\hat{H} \quad (5.24)$$

с компонентами оператора орбитального момента. Компоненты оператора Рунге–Ленца не коммутируют с компонентами \hat{l}_i ; в силу общих соотношений (4.8)

$$[\hat{l}_i, \hat{A}_j] = i\epsilon_{ijk} \hat{A}_k. \quad (5.25)$$

Наличие не коммутирующих между собой и сохраняющихся (т. е. коммутирующих с \hat{H}) операторов \hat{A}_i , \hat{l}^2 ведет, согласно общим результатам п. 1.18, к вырождению собственных значений гамильтониана \hat{H} частицы в кулоновском поле. Непосредственно из формулы (5.18) видно, что состояние с главным квантовым числом n вырождено по значениям l с кратностью $g = n$. Такое вырождение, связанное с наличием дополнительного интеграла движения (5.23), специфично для кулоновского поля и называется *случайным*.

Как и во всяком центральном поле, состояния с заданными значениями n и l вырождены по величине проекции момента с кратностью $2l + 1$. Таким образом, полная кратность вырождения состояния с главным квантовым числом n есть

$$G = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2.$$

7. Состояния атома водорода с квантовыми числами n, l, m мы будем обозначать векторами $|n l m\rangle$, указывая значения квантовых чисел всегда в таком порядке. Радиальные ВФ определяются формулами (5.16) и (5.17) и зависят, в силу центральной симметрии, только от n и l :

$$R_{nl}(\rho) = A_{nl} \rho^l e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho), \quad (5.26)$$

где A_{nl} — нормировочные множители, а $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ — полиномы Лаггера, которые с точностью до постоянного множителя определяются первыми членами разложения (5.17). Приведем выражения для простейших случаев:

$$(1s) : L_1^1 = 1, \quad (2s) : L_2^1 = 1 - \frac{r}{2},$$

$$(2p) : L_3^3 = 1, \quad (3s) : L_3^1 = 1 - \frac{2}{3}r + \frac{2}{27}r^2.$$

Так как угловые части ВФ, определяющие СФ операторов \hat{l}^2 и \hat{l}_z , мы выбрали нормированными, то радиальные ВФ следует нормировать условием

$$\int_0^{\infty} R_{nl}^2(r) r^2 dr = 1. \quad (5.27)$$

Нормированные радиальные функции имеют вид

$$R_{nl}(r) = -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} e^{-\frac{r}{n}} \left(\frac{2r}{n}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n}\right).$$

Приведем явный вид полных ВФ состояний $1s, 2s, 2p$ с различными проекциями орбитального момента:

$$|1, 0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r},$$

$$|2, 0, 0\rangle = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \left(1 - \frac{r}{2}\right) e^{-r/2},$$

$$|2, 1, 0\rangle = i \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} r e^{-r/2} \cos \theta,$$

$$|2, 1, \pm 1\rangle = \mp i \frac{1}{8\sqrt{\pi}} r e^{-r/2} \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi}.$$

8. При рассмотрении задачи двух тел в п. 5.0 мы нашли, что система описывается ВФ вида

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \Psi\left(\frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}\right) \psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (5.28)$$

Если между частицами существует взаимодействие, то $\psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ не есть ВФ свободного движения. В этом случае $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ нельзя представить в виде произведения ВФ частиц $\varphi(\mathbf{r}_1)\varphi(\mathbf{r}_2)$: переменные, которые разделяются в УШ, не есть координаты частиц. При наличии взаимодействия между частицами, волновой функцией описывается лишь система в целом, но не каждая из частиц. В соответствии с основным положением А2 это означает, что теряет смысл понятие состояния отдельной частицы.

Для каждой подсистемы можно ввести некоторый оператор, который позволяет вычислить все величины, относящиеся к этой подсистеме. Ограничимся случаем, когда подсистема есть отдельная частица. Пусть \hat{f}_1 — оператор, действующий на координаты частицы 1. Тогда его среднее значение можно представить в виде

$$\bar{f}_1 = \iint \Psi^*(\mathbf{r}_1, q) \hat{f}_1 \Psi(\mathbf{r}_1, q) d\mathbf{r}_1 dq, \quad (5.29)$$

где q обозначает все, кроме \mathbf{r}_1 , аргументы Ψ .

Интегральный оператор с ядром

$$\rho(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_1) = \int \Psi^*(q, \mathbf{r}'_1) \Psi(q, \mathbf{r}_1) dq$$

называется *матрицей плотности* частицы 1. Из сравнения с (5.29) получаем выражение для среднего значения оператора \hat{f}_1 :

$$\bar{f}_1 = \text{Sp } \hat{f}_1 \hat{\rho}.$$

Очевидно, матрица плотности есть эрмитов оператор

$$\rho^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \rho(\mathbf{r}', \mathbf{r}).$$

Диагональные элементы матрицы плотности

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}) = \int |\Psi(q, \mathbf{r})|^2 dq$$

определяют распределение вероятности координат частицы. Из условия нормировки следует, что $\text{Sp } \hat{\rho} = 1$.

9. Матрица плотности зависит от состояния системы в целом. Так, для системы двух тел в состоянии с импульсом центра масс \mathbf{P}

$$\rho(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_1) = \int \exp\left[i \frac{\mathbf{P}m_1(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1)}{\hbar(m_1 + m_2)}\right] \Psi^*(\mathbf{r}'_1 - \mathbf{r}_2) \Psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2.$$

В состоянии с центром масс, локализованным в начале координат,

$$\rho(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_1) = \psi^* \left[\mathbf{r}'_1 \left(1 + \frac{m_1}{m_2} \right) \right] \psi \left[\mathbf{r}_1 \left(1 + \frac{m_1}{m_2} \right) \right] \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \right)^3.$$

В атоме водорода масса электрона m_1 много меньше массы протона m_2 . Поэтому в состоянии с центром масс в начале координат матрица плотности для электрона

$$\rho(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_1) \approx \psi^*(\mathbf{r}'_1)\psi(\mathbf{r}_1)$$

мало отличается от матрицы плотности электрона в поле неподвижного кулоновского центра. Поэтому ВФ $\psi(\mathbf{r})$ УШ для атома водорода иногда называют волновой функцией электрона, что следует понимать с учетом сделанных выше оговорок.

Состояния частицы, которые описываются ВФ (т. е. состояния в смысле основного положения А2), называются чистыми состояниями в отличие от смешанных состояний, для которых матрица плотности не распадается на произведения множителей $\psi(\mathbf{r})\psi'(\mathbf{r}')$. В атоме водорода электрон и протон находятся в смешанных состояниях.

Возможна и другая интерпретация: вместо смешанных состояний протона и электрона мы можем рассматривать систему двух взаимодействующих квазичастиц: тяжелой, с массой M , совершающей свободное движение, и легкой, с массой $m \approx m_e$, находящейся в кулоновском поле фиксированного центра. Введенные таким образом квазичастицы находятся в чистых состояниях.

10. Рассмотрим движение частицы в поле трехмерного осциллятора

$$U(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2}.$$

Такой потенциал может быть использован для описания некоторых свойств атомных ядер. В декартовых координатах решение УШ можно искать в виде

$$\psi(r) = \psi_1(x)\psi_2(y)\psi_3(z).$$

Каждая из функций ψ_i удовлетворяет одномерному УШ для гармонического осциллятора с энергетическим спектром

$$E_i = (n_i + 1/2) \hbar\omega.$$

Полная энергия равна сумме E_i согласно п. 3.0:

$$E = (n_1 + n_2 + n_3 + 3/2) \hbar\omega.$$

Итак, энергетический спектр трехмерного осциллятора

$$E_n = (n + 3/2) \hbar\omega. \quad (5.30)$$

Уровни энергии вырождены: кратность вырождения n -го уровня равна числу способов разбиения целого числа n на сумму трех целых неотрицательных чисел:

$$g(n) = \frac{1}{2} (n + 1)(n + 2).$$

ВФ стационарных состояний в декартовых координатах имеют вид

$$|n_1, n_2, n_3\rangle = A e^{-\lambda r^2/2} H_{n_1}(\sqrt{\lambda} x) H_{n_2}(\sqrt{\lambda} y) H_{n_3}(\sqrt{\lambda} z),$$

где

$$\lambda = m\omega/\hbar,$$

H_k — полином Эрмита. Так как четность k -го полинома Эрмита есть $(-1)^k$, то четность волновой функции

$$P|n_1, n_2, n_3\rangle = (-1)^{n_1+n_2+n_3} = (-1)^n.$$

Состояние с определенными n_1, n_2, n_3 не имеет, вообще говоря, определенных значений l и m . Состояние с определенными l и m найдем, рассматривая движение частицы в сферических координатах. Уравнение для радиальной части ВФ имеет вид

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2 \omega^2 r^2}{\hbar^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0. \quad (5.31)$$

Положим $k = \hbar^{-1} \sqrt{2mE}$. Подстановкой $\chi = rR$ уравнение (5.31) сводится к виду

$$\chi'' + \left[k^2 - \lambda^2 r^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi = 0.$$

Учитывая асимптотики ВФ при $r \rightarrow 0$, $r \rightarrow \infty$, представим его решение в виде

$$\chi = r^{l+1} e^{-\lambda r^2/2} w(r).$$

Уравнение для $w(r)$ есть

$$w'' + 2 \left(\frac{l+1}{r} - \lambda r \right) w' - \left[2\lambda \left(l + \frac{3}{2} \right) - k^2 \right] w = 0.$$

Вводя новую независимую переменную

$$\rho = \lambda r^2,$$

перепишем (5.31) в форме

$$\rho \frac{d^2 w}{d\rho^2} + \left[\left(l + \frac{3}{2} \right) - \rho \right] \frac{dw}{d\rho} + \left[\frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} \right) - \frac{1}{2} \frac{k^2}{2\lambda} \right] w = 0.$$

Решение такого уравнения, растущее при $\rho \rightarrow \infty$ не быстрее конечной степени ρ , отыскивалось в п. 5.6. Условие существования такого решения

$$\frac{1}{2} \left(l + \frac{3}{2} - \frac{k^2}{2\lambda} \right) = -n_r \quad (n_r = 0, 1, 2, \dots)$$

определяет энергетический спектр

$$E_{n_r, l} = \hbar\omega (l + 2n_r + 3/2).$$

Сравнивая с (5.30), видим, что

$$n = l + 2n_r.$$

Уровень энергии с заданным n может иметь разные значения l , т. е., как и в кулоновском поле, имеется случайное вырождение уровней по значениям момента. В отличие от кулоновского поля состояние с заданным n имеет определенную четность $P(n) = (-1)^n$.

11. Рассмотрим состояние дискретного спектра частицы в поле сферической ямы — разрывного потенциала

$$\begin{aligned} U(r) &= -U_0 \quad (r < a), \\ U(r) &= 0 \quad (r > a). \end{aligned}$$

Сферическая яма представляет интерес как пример короткодействующих потенциалов, убывающих при $r \rightarrow \infty$ быстрее любой отрицательной степени r . Полагая

$$k^2 = \frac{2m(U_0 - |E|)}{\hbar^2}, \quad \alpha^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2},$$

мы получим внутри ямы уравнение, совпадающее с УШ для свободного движения с энергией $E' = -|E| + U_0$:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR^i}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R^i + k^2 R^i = 0, \quad (5.32)$$

и вне ямы:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR^e}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R^e - \alpha^2 R^e = 0. \quad (5.33)$$

Рассмотрим вначале решения, соответствующие нулевому моменту; уравнение (5.32) принимает вид

$$\frac{d^2}{dr^2} (rR^i) + k^2 rR^i = 0. \quad (5.34)$$

Конечное при $r = 0$ решение этого уравнения:

$$R_0^i = \alpha \frac{\sin kr}{r}. \quad (5.35)$$

Уравнение (5.33) при $l = 0$ принимает вид

$$\frac{d^2}{dr^2} (rR^e) - \alpha^2 rR^e = 0. \quad (5.36)$$

Его решение, убывающее при $r \rightarrow \infty$, имеет вид

$$R_0^e = \beta \frac{e^{-\alpha r}}{r},$$

α и β — нормировочные постоянные. Условие непрерывности логарифмической производной от rR при $r = a$ дает

$$k \operatorname{ctg} ka = -\alpha = -\sqrt{\frac{2mU_0}{\hbar^2} - k^2}.$$

Представим это уравнение в виде

$$-\operatorname{ctg} z = \sqrt{Bz^{-2} - 1}, \quad (5.37)$$

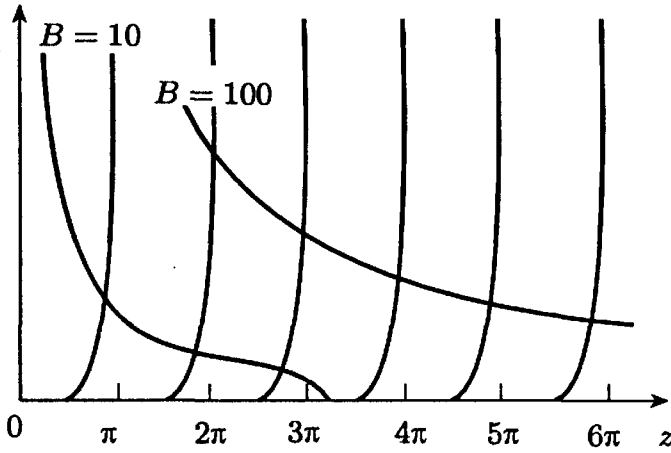


Рис. 14

где $z = ka$, B — борновский параметр, и рассмотрим его решение графически. На рис. 14 правая часть (5.37) изображена при двух различных значениях B . Очевидно, уравнение не имеет решений при

$$B < \frac{\pi^2}{4}.$$

Таким образом, минимальная глубина U_{\min} сферической ямы, при которой появляется связанное состояние, связана с ее шириной соотношением

$$U_{\min} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

С ростом B график функции в правой части (5.37) проходит все выше при малых z , и первые корни уравнения приближаются к значениям

$$z_n \rightarrow n\pi,$$

$$U_0 - |E_n| \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2.$$

Число связанных состояний с моментом $l = 0$

$$(\xi\pi)^{-1} - 1 < N(0) < (\xi\pi)^{-1} + 1$$

(где $\xi = B^{-1/2}$) растет пропорционально корню из значений глубины ямы. Рассмотрим решение УШ при $l \neq 0$; уравнение для радиальной ВФ (свободного движения)

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR^i}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R^i + k^2 R^i = 0$$

подстановкой

$$R^i = r^{-1/2} Z(r) \tag{5.38}$$

и введением переменной $x = kr$ сводится к уравнению

$$x^2 \frac{d^2 Z}{dx^2} + x \frac{dZ}{dx} + \left(x^2 - l(l+1) - \frac{1}{4} \right) Z = 0$$

— уравнению для функций Бесселя с полуцелым индексом. Итак,

$$R_l = \alpha r^{-1/2} J_{l+1/2}(kr),$$

где α — нормировочная постоянная. Функции Бесселя $J_{l+1/2}$ могут быть в явном виде выражены через элементарные функции. Общее выражение для нормированных радиальных ВФ:

$$R_l(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(\frac{r}{k}\right)^l \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^l \frac{\sin kr}{r}. \quad (5.39)$$

Аналогично, вне ямы уравнение (5.33) подстановкой (5.38) превращается в уравнение для функций Бесселя мнимого аргумента (физические решения должны убывать при $r \rightarrow \infty$). Определение спектра из условия непрерывности при $r = a$ в этом случае чрезвычайно сложно; ограничимся рассмотрением предельного случая очень глубокой ямы ($\xi^2 \ll 1$). В этом случае ВФ для низколежащих уровней вне ямы мала и приближенно можно положить

$$\psi(a) \approx 0.$$

Тогда положение уровней над дном ямы определяется уравнением

$$J_{l+1/2}(ka) = 0.$$

Порядок расположения уровней (от основного состояния):

$$1s, 1p, 1d, 2s, 1f, 2p, 1g, 2d, 1h, 3s.$$

Схема расположения уровней (зависимость $E_n + U_0$ от l) приведена на рис. 15. Вырождение отсутствует: значение энергии однозначно определяет величину орбитального момента.

12. Найдем функцию Грина (ФГ) для радиального уравнения Шредингера

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + [k^2 - v(r)]\chi = 0, \quad (5.40)$$

где введено обозначение

$$v(r) = \frac{2m}{\hbar^2} U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}.$$

Как и в п. 3.12, ФГ следует искать в виде произведения решений $f(r)$, $g(r')$ уравнения (5.40):

$$G(r, r') = \begin{cases} f(r)g(r'), & r < r', \\ g(r)f(r'), & r > r'. \end{cases} \quad (5.41)$$

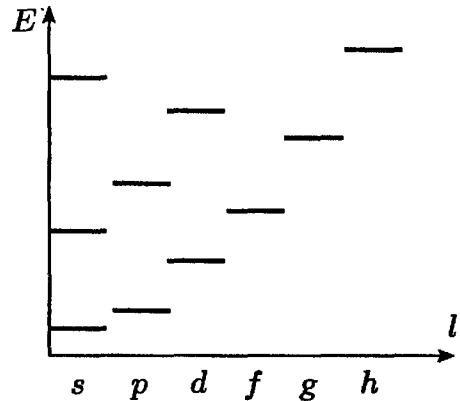


Рис. 15

Функция (5.41) будет ФГ, если будет выполнено условие

$$W(g, f) = \frac{df(r)}{dr}g(r) - f(r)\frac{dg(r)}{dr} = 1. \quad (5.42)$$

С помощью ФГ общее решение неоднородного УШ

$$\widehat{D}_r \psi(r) = Q(r), \quad (5.43)$$

где $Q(r)$ — некоторая функция, можно записать в виде

$$\psi(r) = \varphi(r) + \int_0^{\infty} G(r, r')Q(r') dr', \quad (5.44)$$

где $\varphi(r)$ и $G(r, r')$ — общее решение и ФГ уравнения $\widehat{D}_r \psi = 0$. Используя это соотношение, можно представить в виде интегрального уравнения и однородное УШ (5.40):

$$\varphi(r) = \chi(r) - \int_0^{\infty} G^0(r, r')u(r')\varphi(r') dr', \quad (5.45)$$

где введено обозначение

$$u(r) = \frac{2m}{\hbar^2} U(r),$$

а $\chi(r)$, $G^0(r, r')$ — общее решение и ФГ радиального УШ для свободного движения

$$\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left[k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \chi = 0. \quad (5.46)$$

Уравнение (5.45) будет использовано в гл. 9 при рассмотрении состояний непрерывного спектра в центральном поле.

13. Формулы (5.45) и (5.46) позволяют получить оценку сверху для числа $\mathcal{N}(l)$ связанных состояний с заданным значением l в поле с потенциалом $U(r)$. Рассмотрим уравнение (5.46). При $k = 0$ линейно независимые решения, согласно (5.6), можно записать в виде

$$f(r) = r^{l+1}, \quad g(r) = r^{-l}. \quad (5.47)$$

Вронскиан вычисляется элементарно:

$$W = (l+1)r^l r^{-l} - (-l)r^{l+1}r^{-(l+1)} = 2l+1.$$

В соответствии с (5.41) ФГ есть

$$G_l(r, r') = \frac{1}{2l+1} r_{<} \left(\frac{r_{<}}{r_{>}} \right)^l,$$

где $r_<$ и $r_>$ — меньшее и большее из r и r' соответственно. Решения (5.47) не принадлежат $L^2(0, \infty)$, поэтому (5.45) принимает вид

$$\varphi_l(r) = \int_0^{\infty} G_l(r, r') u(r') \varphi_l(r') dr'.$$

Рассмотрим потенциал $\gamma u(r)$, где $0 \leq \gamma \leq 1$. Если $u(r)$ удовлетворяет условиям, полученным в задаче 3.8, — в частности, если $u(r) < 0$ всюду, то число связанных состояний $\mathcal{N}(l, \gamma)$ будет возрастающей функцией γ :

$$\mathcal{N}(l, 0) = 0, \quad \mathcal{N}(l, 1) = \mathcal{N}(l),$$

и энергия связанного состояния также будет возрастающей функцией γ . Уравнение (5.45) принимает вид

$$\gamma^{-1} \varphi_l(r) = \int_0^{\infty} G_l(r, r') |u(r')| \varphi(r') dr'. \quad (5.48)$$

Число $\mathcal{N}(l)$ равно полному числу состояний с нулевой энергией, появляющихся при изменении γ от 0 до 1, т. е. равно числу СЗ γ_i^{-1} уравнения (5.48) в этом интервале. Ядру интегрального оператора в правой части (5.48) можно придать симметричную форму, положив

$$\Gamma_l(r, r') = \sqrt{|u(r)| \cdot |u(r')|} G_l(r, r'),$$

$$\Phi_l(r) = \sqrt{|u(r)|} \varphi_l(r).$$

Тогда (5.48) принимает вид

$$\gamma_i^{-1} \Phi_l(r) = \int_0^{\infty} \Gamma_l(r, r') \Phi_l(r') dr'. \quad (5.49)$$

Оператор в правой части имеет симметричное действительное ядро, поэтому он эрмитов. Сумма СЗ эрмитова оператора, согласно п. 1.19, равна следу ядра:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \gamma_i^{-1} = \text{Sp } \Gamma = \frac{1}{2l+1} \int_0^{\infty} r |u(r)| dr.$$

Так как в общем случае не все СЗ (5.49) лежат в интервале $0 \leq \gamma_i \leq 1$, то

$$\mathcal{N}(l) \leq \frac{1}{2l+1} \int_0^{\infty} r |u(r)| dr. \quad (5.50)$$

Это соотношение называется *неравенством Баргмана*. Оно позволяет сделать некоторые выводы о дискретном спектре в поле с потенциалом $u(r)$. Если при $r \rightarrow 0$

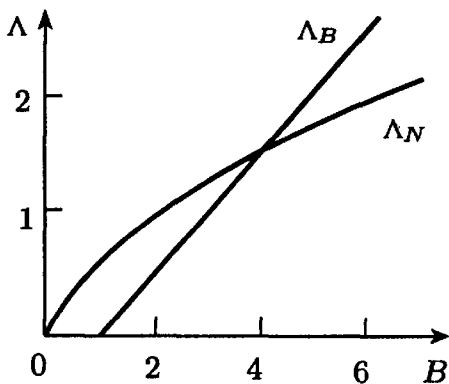


Рис. 16

то интеграл сходится на нижнем пределе и число состояний с ВФ, локализованной вблизи начала координат, конечно: у системы нет бесконечно глубоких уровней. Если потенциал $|u(r)|$ при $r \rightarrow \infty$ убывает быстрее, чем r^{-2} , то интеграл сходится на верхнем пределе: в системе нет сколь угодно мелких уровней, соответствующих большим средним расстояниям частицы от центра.

Из неравенства Баргмана следует также оценка для Λ — максимального момента, при котором может существовать связанное состояние. Если $U(r) = -U_0 f(r/a)$, то из (5.50) следует:

$$2\Lambda_B + 1 \leq B \int_0^{\infty} f(x)x dx. \quad (5.51)$$

Коэффициент при борновском параметре B есть безразмерная константа порядка единицы. Пренебрегая коэффициентами при B в правых частях неравенств (5.12) и (5.51), можно сравнить следующие из них оценки Λ . Зависимость Λ_N и Λ_B от B показаны на рис. 16. Видно, что неравенство Баргмана дает существенно лучшую оценку для Λ при небольших значениях $B \lesssim 5$. При больших B лучше оценка Λ_N .

ЗАДАЧИ

1. Доказать, что в стационарных состояниях частицы в кулоновском поле для оператора Рунге–Ленца (5.23) имеют место соотношения

$$\widehat{A}\widehat{I} = 0 = \widehat{I}\widehat{A}, \quad \widehat{l}^2 + n^2 \widehat{A}^2 + 1 = n^2,$$

где n — главное квантовое число.

В приложениях часто необходимы средние значения величин r^k в стационарных состояниях частицы в кулоновском поле $|n, l\rangle$.

2. Вычислить $\overline{r^{-1}}$, используя теорему вириала (2.18).
3. Вычислить $\overline{r^{-2}}$, используя теорему Хеллмана–Фейнмана (3.13).
4. Доказать рекуррентную формулу Крамерса

$$-\frac{k+1}{n^2} \overline{r^k} + (2k+1) \overline{r^{k-1}} + k \left[\frac{k^2-1}{4} - l(l+1) \right] \overline{r^{k-2}} = 0$$

для средних значений $\overline{r^k}$.

5. Используя результаты двух предыдущих задач, вычислить средние значения $\frac{1}{r^1}, \frac{1}{r^3}$.

6. Найти решение УШ для частицы в кулоновском поле при $E = 0$.

7. Определить средний потенциал электрического поля, создаваемый атомом водорода в основном состоянии.

8. Найти дискретный спектр частицы в поле

$$U(r) = \frac{\alpha}{r^2} - \frac{\beta}{r} \quad (\beta > 0).$$

9. Найти решение УШ в поле с потенциалом

$$U(r) = -U_0 \left(\frac{a}{r} \right)^2.$$

Показать, что при $B - l(l + 1) < 1/4$ связанных состояний нет. Отметим, что граничное условие (5.7) в этой задаче неприменимо из-за сингулярности потенциала. Поэтому любое квадратично интегрируемое решение УШ будет описывать связанное состояние.

10. Случайное вырождение по l уровней энергии трехмерного осциллятора указывает на наличие сохраняющихся операторов, не коммутирующих с \hat{l}^2 . Найти эти операторы и их коммутационные соотношения с \hat{l}_i и \hat{l}^2 .

Потенциалами, рассмотренными в пп. 5.5, 5.11 и в задачах 5.8 и 5.9, практически исчерпываются случаи, когда УШ допускает точное решение при любых значениях l . Для короткодействующих потенциалов мы ограничимся рассмотрением s -состояний.

11. Найти спектр s -состояний частицы в поле

$$U(r) = -U_0 e^{-r/a}.$$

12. Найти спектр s -состояний частицы в поле

$$U(r) = U_0 (e^{r/a} - 1)^{-1}.$$

13. Рассмотреть предельный переход $U_0 \rightarrow \infty, a \rightarrow 0$ для сферической ямы в s -случае. Найти условие, при котором в пределе остается одно связанное состояние заданной энергии.

14. Взаимодействие между нуклонами зависит от их спинового состояния. В триплетном состоянии взаимодействие можно описывать короткодействующим потенциалом притяжения с глубиной $U_0 \approx 20 - 30$ МэВ и характерной длиной $a \approx 2 \cdot 10^{-13}$ см. Найти Λ — максимальное значение момента, при котором может существовать связанное состояние двух нуклонов.

15. Используя результат задачи 5.7, оценить возможность устойчивого существования иона H_1^- .

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ И ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД

0. Точное решение УШ возможно лишь в небольшом числе случаев. Во многих задачах, однако, гамильтониан может быть представлен в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \varepsilon \hat{V}, \quad (6.1)$$

причем уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \hat{H}_0 \varphi \quad (6.2)$$

допускает точное решение, а оператор возмущения $\varepsilon \hat{V}$ в некотором смысле мал. Методы отыскания решений (приближенных) УШ с гамильтонианом (6.1) составляют предмет теории возмущений. В этой главе мы используем теорию возмущений для нахождения дискретного спектра \hat{H} и соответствующих собственных функций.

1. Пусть известны решения стационарного УШ

$$\hat{H}_0 \varphi_m = e_m \varphi_m. \quad (6.3)$$

Допустим, что СФ и СЗ уравнения

$$\hat{H} \psi_m = E_m \psi_m \quad (6.4)$$

можно представить в виде разложения по степеням малого параметра ε :

$$\psi_m = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n \psi_m^{(n)}, \quad (6.5)$$

$$E_m = \sum_{n=0}^{\infty} \varepsilon^n E_m^{(n)}. \quad (6.6)$$

Такой метод, при котором СФ и СЗ представляются в виде разложения по степеням малого параметра, называется *теорией возмущений Рэлея–Шредингера*. Нумерация E_m выбрана такой, что при $\varepsilon \rightarrow 0$ $E_m \rightarrow e_m$. Подставляя (6.5), (6.6) в УШ

$$(\hat{H}_0 + \varepsilon \hat{V}) \psi_m = E_m \psi_m,$$

получим

$$\hat{H}_0 \sum \varepsilon^n \psi_m^{(n)} + \hat{V} \sum \varepsilon^{n+1} \psi_m^{(n)} = \sum \varepsilon^n \sum_{r=0}^n E_m^{(r)} \psi_m^{(n-r)}.$$

Приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях ϵ , получаем

$$(\hat{H}_0 - E_m^{(0)})\psi_m^{(0)} = 0, \quad (6.7)$$

$$(\hat{H}_0 - E_m^{(0)})\psi_m^{(s)} + \hat{V}\psi_m^{(s-1)} = E_m^{(s)}\psi_m^{(0)} + \sum_{r=1}^{s-1} E_m^{(r)}\psi_m^{(s-r)}. \quad (6.8)$$

В дальнейшем параметр ϵ будем включать в оператор \hat{V} . Рекуррентную формулу для $E_m^{(r)}$ получим, умножая (6.8) на $\psi_m^{(0)*}$ и интегрируя по всем значениям аргументов:

$$E_m^{(s)} = \langle m^{(0)} | \hat{V} | m^{(s-1)} \rangle - \sum_{r=1}^{s-1} E_m^{(r)} \langle m^{(0)} | m^{(s-r)} \rangle. \quad (6.9)$$

Полагая $s = 1$, получим, учитывая (6.7),

$$E_m^{(1)} = \langle m^{(0)} | \hat{V} | m^{(0)} \rangle. \quad (6.10)$$

Поправка первого порядка к энергии есть среднее значение возмущения в состоянии φ_m . Определение высших поправок требует использования поправок к ВФ. Разложим $\psi_m^{(1)}$ по невозмущенным СФ φ_m (считая, что \hat{H}_0 имеет только дискретный спектр):

$$\psi_m^{(1)} = \sum_k a_{km}^{(1)} \psi_k^{(0)}. \quad (6.11)$$

Подставляя (6.11) в (6.8) при $s = 1$, умножая на $\psi_m^{(0)*}$ и интегрируя, находим

$$a_{mn}^{(1)} (e_n - e_m) + \langle m | \hat{V} | n \rangle = \langle m | \hat{V} | m \rangle \delta_{mn}, \quad (6.12)$$

где введено обозначение

$$\langle m | \hat{V} | n \rangle = (\varphi_m^{(0)}, \hat{V} \varphi_n^{(0)}) = V_{mn}. \quad (6.13)$$

Если СЗ не вырождены ($e_m \neq e_n$), то при $m \neq n$ формула (6.12) дает

$$a_{mn}^{(1)} = \frac{\langle m | \hat{V} | n \rangle}{e_n - e_m}. \quad (6.14)$$

При $m = n$ уравнение (6.12) удовлетворяется тождественно; если положить $a_{nn}^{(1)} = 0$, то ВФ

$$\psi_n^{(1)} = \psi_n^{(0)} + \sum'_m \frac{\langle m | \hat{V} | n \rangle}{e_n - e_m} \psi_m^{(0)} \quad (6.15)$$

(где штрих у знака суммы означает, что слагаемое с $m = n$ исключено из суммирования) будет нормирована с точностью до первого порядка по ϵ .

2. Полагая в (6.9) $s = 2$ для поправки к энергии второго порядка получаем

$$E_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | \widehat{V} | n^{(1)} \rangle - E_n^{(1)} \langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle.$$

Используя разложение (6.11) и то обстоятельство, что в силу эрмитовости $\langle m | \widehat{V} | n \rangle = \langle n | \widehat{V} | m \rangle^*$, находим

$$E_n^{(2)} = \sum'_m \frac{|\langle m | \widehat{V} | n \rangle|^2}{e_n - e_m}. \quad (6.16)$$

Это выражение можно преобразовать, учитывая соотношение

$$\sum_k \langle m | \widehat{V} | k \rangle \langle k | \widehat{V} | n \rangle = |\langle m | \widehat{V} | n \rangle|, \quad (6.17)$$

к виду

$$E_n^{(2)} = \frac{1}{e_n} \left[\langle n | \widehat{V}^2 | n \rangle - (\langle n | \widehat{V} | n \rangle)^2 - \sum'_m \frac{e_m}{e_n - e_m} |\langle m | \widehat{V} | n \rangle|^2 \right]. \quad (6.18)$$

Формула (6.18) иногда более удобна для вычислений, чем (6.16), например, если $|E_m| \ll |E_n|$, то вклад таких слагаемых в сумму в (6.18) незначителен.

3. Для поправок высших порядков, полагая

$$\psi_n^{(s)} = \sum_m a_{mn}^{(s)} \varphi_m,$$

из (6.8) находим

$$E_n^{(s)} = \sum'_m a_{nm}^{(s-1)} \langle n | \widehat{V} | m \rangle - \sum_{r=2}^{s-1} E_n^{(r)} a_{nn}^{(s-r)},$$

где

$$a_{ml}^{(0)} = \delta_{ml},$$

$$a_{ml}^{(s)} = \frac{1}{e_l - e_m} \left[- \sum_k a_{mk}^{(s-1)} V_{lk} + \sum_{r=1}^{s-1} a_{ml}^{(s-r)} E_m^{(r)} \right].$$

При определении возмущенных ВФ для вычисления коэффициентов $a_{mn}^{(s)}$ мы будем требовать, чтобы функция $\sum_{n=0}^p \psi_m^{(n)}$ была нормирована с точностью до ϵ^p . Это приводит к условию

$$\sum_{k=0}^n \langle m^{(k)} | m^{(n-k)} \rangle = \sum_{k=0}^n \sum_s (a_{ms}^{(k)*} a_{ms}^{(n-k)} + a_{ms}^{(k)} a_{ms}^{(n-k)*}) = 0.$$

Мнимые части всех $a_{mm}^{(k)}$, влияющие на фазу ψ_m , мы будем полагать равными нулю. При $n = +2$

$$a_{mm}^{(2)} = -\frac{1}{2} \sum_n' \frac{|\langle m|\hat{V}|n\rangle|^2}{(e_n - e_m)^2},$$

$$a_{ml}^{(2)} = \frac{1}{e_l - e_m} \left[-\sum_s a_{ms}^{(1)} \langle l|\hat{V}|s\rangle + E_m^{(1)} a_{ml}^{(1)} \right].$$

Подставляя в выражение в квадратных скобках формулы (6.10) и (6.14), находим

$$a_{ml}^{(2)} = \frac{1}{e_l - e_m} \sum_k \frac{\langle m|\hat{V}|k\rangle \langle k|\hat{V}|l\rangle}{e_k - e_m} - \frac{\langle m|\hat{V}|m\rangle \langle l|\hat{V}|m\rangle}{(e_l - e_m)^2}. \quad (6.19)$$

Отсюда получаем окончательно выражение для ВФ второго порядка:

$$\psi_m^{(2)} = \sum_k' \sum_l' \frac{\langle m|\hat{V}|l\rangle \langle l|\hat{V}|k\rangle}{(e_k - e_m)(e_l - e_m)} \varphi_k -$$

$$- \sum_s' \frac{\langle m|\hat{V}|m\rangle \langle s|\hat{V}|m\rangle}{(e_s - e_m)^2} \varphi_s - \frac{1}{2} \sum_s \frac{|\langle m|\hat{V}|s\rangle|^2}{(e_s - e_m)^2} \varphi_m. \quad (6.20)$$

4. Индексы у E_n и ψ_n в предыдущем изложении представляют собой, в общем случае, не просто номера энергетических уровней, а совокупность всех квантовых чисел, определяющих положение системы. Если уровни дискретного спектра вырождены, т. е. если при $m \neq n$

$$e_m = e_n,$$

то полученные выше результаты неприменимы непосредственно, так как в суммах (6.15), (6.16) могут появиться бесконечные слагаемые. Напомним, что дискретный спектр одномерного движения всегда не вырожден, а дискретный спектр частицы в центральном поле в состоянии с моментом l всегда вырожден с кратностью $(2l + 1)$ по величине проекции момента.

Пусть уровень E_m вырожден с кратностью g , а φ_{mi} — произвольные ортонормированные ВФ этого уровня ($1 \leq i \leq g$). Используя формулы (6.7), (6.8), при любом i имеем

$$\hat{H}_0 \varphi_{mi}^{(0)} = e_m \varphi_{mi}^{(0)}, \quad (6.21)$$

$$(\hat{H}_0 - e_m) \varphi_{mi}^{(1)} = -\hat{V} \varphi_{mi}^{(0)} + E_m^{(1)} \varphi_{mi}^{(0)}. \quad (6.22)$$

Умножая (6.22) на $\varphi_{mk}^{(0)}$ скалярно, получим, учитывая вытекающее из эрмитовости гамильтониана \hat{H}_0 равенство

$$(\varphi_{mk}^{(0)}, (\hat{H}_0 - e_m) \varphi_{mi}^{(1)}) = ((\hat{H}_0 - e_m) \varphi_{mk}^{(0)}, \varphi_{mi}^{(1)}) = 0,$$

следующее соотношение:

$$\langle mk | \hat{V} | mi \rangle = E_{mi}^{(1)} \langle mk | mi \rangle = E_{mi}^{(1)} \delta_{ki}. \quad (6.23)$$

Таким образом, функция в правой части (6.22) должна быть ортогональна ко всем $\varphi_{mk}^{(0)}$, что выполняется не при всяком выборе ВФ нулевого приближения. Рассмотрим линейную комбинацию ВФ вырожденного уровня

$$\psi_{mi}^{(0)} = \sum_{j=1}^g b_{ij} \varphi_{mi}^{(0)}.$$

Такая комбинация тоже будет СФ невозмущенного гамильтониана, соответствующей значению E_m . Набор $\psi_{mi}^{(0)}$ ($1 \leq i \leq g$) будет ортонормированным, если матрица b_{ij} унитарна.

Подставляя в правую часть (6.22) функции $\psi_{mi}^{(0)}$ и требуя ортогональности ко всем $\varphi_{mk}^{(0)}$, приходим к системе линейных уравнений для коэффициентов b_{ij} :

$$\sum_j \langle k | \hat{V} | j \rangle b_{ij} - E_i^{(1)} b_{ik} = 0. \quad (6.24)$$

Система линейных уравнений (6.24) имеет нетривиальные решения, только если детерминант из коэффициентов при b_{ij} обращается в нуль:

$$\text{Det} (V_{jk} - E^{(1)} \delta_{jk}) = 0. \quad (6.25)$$

Это уравнение, называемое *секулярным*, имеет в общем случае g различных действительных корней, которые и представляют искомые поправки первого приближения к энергии уровня E_m . Отсутствие комплексных корней является следствием эрмитовости оператора возмущения \hat{V} . Нумеруя корни секулярного уравнения как $E_i^{(1)}$ и подставляя их в (6.24), найдем коэффициенты b_{ik} , определяющие правильные ВФ нулевого приближения. Если все $E_i^{(1)}$ различны (возмущение полностью снимает вырождение), то вычисление высших поправок ведется как в п. 6.1.

5. Если невозмущенный уровень принадлежит к группе близких уровней (квазивырожденный случай), то все вычисления по теории возмущений удобно вести так же, как и при наличии вырождения. Этим подходом можно исключить появление больших поправок к СФ и СЗ. Пусть близко расположены уровни с $1 \leq n \leq g$. Представим оператор возмущения в виде

$$\hat{V} = \hat{f}_1 + \hat{f}_2,$$

где операторы \hat{f}_1 , \hat{f}_2 определены соотношениями:

$$\begin{aligned} \langle i|\hat{f}_1|j\rangle &= (E_1 - E_j) \delta_{ij} \quad (i, j \leq g), \\ \langle m|\hat{f}_1|n\rangle &= 0 \quad (m, n > g), \\ \langle i|\hat{f}_1|n\rangle &= 0 \quad (n > g, i \leq g), \\ \langle i|\hat{f}_2|j\rangle &= \langle i|\hat{V}|j\rangle - (E_1 - E_j) \delta_{ij} \quad (i, j \leq g), \\ \langle m|\hat{f}_2|n\rangle &= \langle m|\hat{V}|n\rangle \quad (m, n > g), \\ \langle i|\hat{f}_2|n\rangle &= \langle i|\hat{V}|n\rangle \quad (n > g, i \leq g). \end{aligned}$$

Собственными функциями оператора $\hat{H}' = \hat{H}_0 + \hat{f}_1$ являются те же φ_m , что и у оператора \hat{H}_0 . Но теперь группе первых g уровней соответствует одно значение E_1 . Используя результаты п. 6.4, представим ВФ нулевого приближения в виде

$$\psi_i^{(0)} = \sum_{j=1}^g b_{ij} \varphi_j. \quad (6.26)$$

Тогда имеет место система уравнений:

$$\sum_{j=1}^g b_{ij} \left[\langle k|\hat{V}|i\rangle - (E_1 - E_j) \delta_{ij} \right] = E^{(1)} b_{ik}. \quad (6.27)$$

Поправки $E^{(1)}$ и коэффициенты b_{ik} вычислим, приравняв нулю определитель системы (6.27).

Рассмотрим случай двух близких уровней ($g = 2$). Секулярное уравнение для $E^{(1)}$:

$$\text{Det} \begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{12}^* & V_{22} + \Delta - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0,$$

где $\Delta = E_2 - E_1$ — расстояние между невозмущенными уровнями, приводит к значениям поправок

$$E_{1,2}^{(1)} = \frac{\Delta + V_{11} + V_{22}}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\Delta + V_{22} - V_{11})^2 + 4|V_{12}|^2}. \quad (6.28)$$

Рассмотрим вид этого выражения в различных предельных случаях. Если $|\Delta + V_{22} - V_{11}| \gg |V_{12}|$, то

$$\begin{aligned} E_1^{(1)} &\approx V_{11} - \frac{|V_{12}|^2}{\Delta + V_{22} - V_{11}}, \\ E_2^{(1)} &\approx V_{22} + \Delta + \frac{|V_{12}|^2}{\Delta + V_{22} - V_{11}}. \end{aligned} \quad (6.29)$$

В частном случае $V_{11} = V_{22} = 0$ из (6.29) следуют выражения

$$E_1 \approx -\frac{|V_{12}|^2}{\Delta}, \quad E_2 \approx +\frac{|V_{12}|^2}{\Delta}.$$

Таким образом, учет квазивырождения приводит в первом порядке теории возмущений к формулам, которые включают также и главный член второго порядка теории возмущений без вырождения. Поправки к энергии зависят от величины возмущения квадратично. В другом предельном случае

$$|\Delta + V_{22} - V_{11}| \gg |V_{12}|$$

получаем

$$E_{1,2}^{(1)} \approx \frac{\Delta + V_{22} + V_{11}}{2} \pm \left[|V_{12}| + \frac{(\Delta + V_{22} - V_{11})^2}{8|V_{12}|} \right].$$

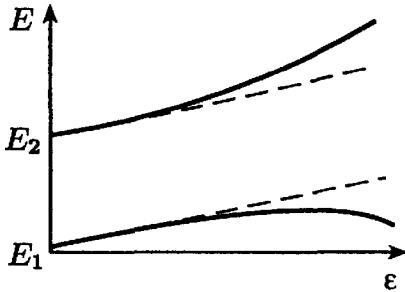


Рис. 17

Если $V_{11} = V_{22} = 0$, то зависимость поправок от величины возмущения близка к линейной. Положение возмущенных уровней в зависимости от величины возмущения показано на рис. 17. Заметим, что под действием возмущения расстояние между близкими уровнями увеличивается. Это явление называется *отталкиванием уровней*.

6. При вычислении поправок для СЗ E_m можно обойти процедуру разложения ВФ по степеням малого параметра ϵ и ее последующей нормировки. В самом деле, система СФ невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 — полная и ортонормированная. Можно вычислить матричные элементы \hat{H} в этом базисе (недиагональные элементы будут отличны от нуля только для \hat{V}) и диагонализировать полученную матрицу. В принципе такой подход должен привести к точным значениям уровней гамильтониана \hat{H} (см. п. 1.15).

Рассмотрим метод приближенной диагонализации, который называется *теорией возмущений Бриллюэна–Вигнера*. Разложим решение УШ

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})\psi_m = E\psi_m \quad (6.30)$$

по СФ невозмущенного гамильтониана:

$$\psi_m = \sum_n c_{mn} \phi_n.$$

Подстановка этого разложения в (6.30) дает

$$c_{mn}(E_n - E_m^{(0)}) = \sum_k c_{kn} V_{mk}. \quad (6.31)$$

Полагая $n = m$, получим

$$(E_m - E_m^{(0)}) = V_{mm} + \frac{1}{c_{mm}} \sum'_k c_{km} V_{mk}. \quad (6.32)$$

Повторными подстановками (6.32) в правую часть (6.31) получаем, выделяя каждый раз в сумме слагаемое с $k = m$,

$$E_m^{(n)} = \sum_{s=0}^n E_m^{(s)} + \Delta^{(n)}, \quad (6.33)$$

где

$$E_m^{(1)} = V_{mm},$$

$$E_m^{(s)} = \sum'_{k_1} \sum'_{k_2} \dots \sum'_{k_s} \frac{V_{mk_1} V_{k_1 k_2} \dots V_{k_s m}}{(E_m - E_{k_1}^{(0)})(E_m - E_{k_2}^{(0)}) \dots (E_m - E_{k_s}^{(0)})},$$

$$\Delta^{(n)} = \frac{1}{c_{mm}} \sum'_{k_1} \dots \sum'_{k_n} \frac{V_{mk_1} \dots V_{k_n m} c_{mk_n}}{(E_m - E_{k_1}^{(0)})(E_m - E_{k_2}^{(0)}) \dots (E_m - E_{k_n}^{(0)})}.$$

Очевидно, k -й член разложения имеет порядок ϵ^k . Разложение (6.33) точное и становится приближенным, если опустить член $\Delta^{(n)}$. Фактически разложение (6.33) определяет E_m неявно, так как E_m входит в знаменатели всех членов с $s \geq 2$. Однако это разложение свободно от трудностей, связанных с наличием вырождения. В самом деле, процедура отыскания правильных ВФ нулевого приближения, рассмотренная в п. 6.4, состоит в диагонализации субматрицы H_{mn} на подпространстве ВФ вырожденного уровня. Если в разложении (6.33) подставлять в формулы для $E_m^{(s)}$ вместо точных (искомых) значений E_m приближенные значения $E_m^{(s-1)}$, то разложение (6.33) перейдет в разложение собственного значения E_m , следующее из теории возмущения Рэлея–Шредингера.

7. Выше мы предполагали, что оператор возмущения \hat{V} в некотором смысле мал. Практически для вычислений используются несколько первых поправок с СЗ. Поэтому естественно под малостью оператора \hat{V} понимать малость первых поправок по сравнению с величиной невозмущенного СЗ. Малость первой поправки

$$|E_n^{(1)}| \ll |e_n| \quad (6.34)$$

не есть достаточное условие применимости теории возмущений. При наличии близких уровней во втором порядке могут появиться члены, большие по сравнению с e_n , даже если (6.34) выполняется. Кроме того, в ряде случаев

$$E_n^{(1)} \equiv 0.$$

Например, это имеет место для системы с гамильтонианом

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x)$$

и возмущением $\varepsilon V(x)$, если $U(x)$ — четная, а $V(x)$ — нечетная функции от x . Малость второй поправки также не есть достаточное условие применимости теории возмущений.

Поясним это на примере *ангармонического осциллятора* — системы с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{x^2}{2} + \varepsilon x^3$$

(мы положили $\hbar, m, \omega = 1$). Пусть ε мало; рассматривая $\hat{V} = \varepsilon x^3$ как возмущение и используя вычисленные в задаче 3.9 матричные элементы

$$\langle n-3 | \varepsilon \hat{V} | n \rangle = \varepsilon \sqrt{\frac{n(n-1)(n-2)}{8}} = \langle n | \varepsilon \hat{V} | n-3 \rangle,$$

$$\langle n-1 | \hat{V} | n \rangle = \varepsilon \sqrt{\frac{9n^3}{8}} = \langle n | \hat{V} | n-1 \rangle,$$

находим

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &\equiv 0, \\ E_n^{(2)} &= -\varepsilon^2 \frac{15}{4} \left(n^2 + n + \frac{11}{30} \right). \end{aligned} \quad (6.35)$$

Эта поправка мала при фиксированном n , если

$$|\varepsilon^2| \ll 4/(15n).$$

Однако сходимость ряда теории возмущений в этом случае сомнительна. При $x \operatorname{sign} \varepsilon > (3|\varepsilon|)^{-1}$ потенциал $U(x) + \varepsilon V(x)$ убывает, стремясь к $-\infty$. Формально движение при любой энергии E инфинитно. Однако потенциал убывает так быстро, что квадратично интегрируемое решение существует при любой энергии E . Дискретный спектр в этом случае можно отобразить, используя требование ортогональности волновых функций в области $(-\infty, X)$. Спектр будет зависеть от граничного условия в точке X , которое, очевидно, не учитывается в вычислениях по теории возмущений.

Рассмотрим осциллятор с возмущением $\hat{V} = \varepsilon x^4$. При $\varepsilon > 0$ наличие дискретного спектра очевидно. Однако и в этом случае ряд теории возмущений будет, по-видимому, расходящимся. Если ряд сходится в точке $\varepsilon = +\varepsilon_0$, то $E(\varepsilon)$ есть аналитическая функция комплексного переменного ε в области $|\varepsilon| < \varepsilon_0$. Следовательно, тогда ряд должен сходиться при отрицательных значениях $-\varepsilon_0 < \varepsilon < 0$. Но при $\varepsilon < 0$ ситуация аналогична рассмотренной выше.

Задача о гармоническом осцилляторе возникает при замене глубокой потенциальной ямы $U(x)$, в которой связанные состояния заведомо существуют, степенным разложением $U(x)$ в окрестности точки x_0 , где $U(x)$ имеет минимум (рис. 18). В этом случае сходимость рядов обеспечивается учетом высших степеней x и выражение (6.35) действительно определяет поправку к энергии дискретного уровня.

8. Собственные значения гамильтониана \hat{H} могут быть найдены из вариационного принципа. Покажем, что СФ гамильтониана реализуют экстремум средней энергии

$$\bar{E} = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle.$$

Найдем условие экстремальности \bar{E} :

$$\delta \int \psi^* \hat{H} \psi dq = 0 \quad (6.36)$$

при дополнительном условии

$$\int \psi^* \psi dq = 1.$$

Комплексно-сопряженные ψ и ψ^* нельзя варьировать независимо. Разделим эти функции на амплитудную и фазовую части:

$$\psi = \theta e^{i\varphi}, \quad \psi^* = \theta e^{-i\varphi}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \delta\psi &= e^{i\varphi} \delta\theta + i\delta\varphi \theta e^{i\varphi}, \\ \delta\psi^* &= e^{-i\varphi} \delta\theta - i\delta\varphi \theta e^{-i\varphi}. \end{aligned} \quad (6.37)$$

Из (6.36) получаем, учитывая эрмитовость \hat{H} :

$$\int \delta\psi^* (\hat{H}\psi) dq + \int \delta\psi (\hat{H}\psi)^* dq = 0.$$

Подставляя (6.37), используя условие нормировки и вводя множитель Лагранжа λ , получаем

$$\begin{aligned} \int \delta\theta \left(e^{-i\varphi} \hat{H} \theta e^{i\varphi} + e^{i\varphi} \hat{H} \theta e^{-i\varphi} - 2\lambda\theta \right) dq + \\ + \int i\delta\varphi \theta \left(e^{i\varphi} \hat{H} \theta e^{-i\varphi} - e^{-i\varphi} \hat{H} \theta e^{i\varphi} \right) dq = 0. \end{aligned} \quad (6.38)$$

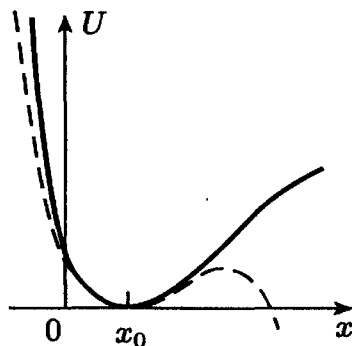


Рис. 18

Используя независимость вариаций амплитуды и фазы, получим, приравняв нулю второй интеграл в (6.38):

$$e^{i\varphi} \hat{H} \theta e^{-i\varphi} = e^{-i\varphi} \hat{H} \theta e^{i\varphi}. \quad (6.39)$$

Подставляя (6.39) в первый интеграл, получим

$$\hat{H} \psi = \lambda \psi$$

— стационарное УШ, где множитель Лагранжа $\lambda = E$ есть собственное значение \hat{H} . Доказательство завершено.

9. Разложим произвольную квадратично интегрируемую функцию по СФ \hat{H} :

$$\psi = \sum_k a_k \psi_k. \quad (6.40)$$

Тогда среднее значение энергии, вычисленное с функцией ψ , равно

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum_k E_k |a_k|^2.$$

Пусть E_0 — энергия основного состояния, тогда

$$E_0 \leq E[\psi] = \bar{E} \quad (6.41)$$

и

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \geq E_0 \sum_k |a_k|^2, \quad (6.42)$$

где

$$E[\psi] = (\langle \psi | \psi \rangle)^{-1} \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle. \quad (6.43)$$

Таким образом, ВФ основного состояния реализует минимум средней энергии; остальные экстремумы соответствуют возбужденным состояниям.

Выражение (6.41) дает оценку сверху для энергии основного состояния. Для получения оценки снизу рассмотрим интеграл

$$I = \langle \psi | (\hat{H} - \bar{E})^2 | \psi \rangle, \quad (6.44)$$

где ψ — произвольная нормированная функция. Используя разложение (6.40), получим

$$\begin{aligned} I &= \sum_k |a_k|^2 (E_k - \bar{E})^2 = \\ &= (E_0 - \bar{E})^2 + \sum_k |a_k|^2 \left[(E_k - \bar{E})^2 - (E_0 - \bar{E})^2 \right]. \end{aligned}$$

Если пробная функция выбрана так, что \bar{E} ближе к E_0 , чем к энергии любого другого состояния, то

$$I \geq (E_0 - \bar{E})^2.$$

Поэтому, учитывая, что по определению

$$I = \overline{E^2} - \bar{E}^2,$$

получаем неравенство

$$E_0 \geq \bar{E} - \sqrt{\overline{E^2} - \bar{E}^2}. \quad (6.45)$$

10. Практически неравенство (6.41) используется для определения энергии основного и первых возбужденных состояний. Выбирается пробная функция $\theta(x, \alpha_i)$, где α_i — набор параметров, вычисляется $E(\alpha_i)$ и отыскиваются значения параметров, минимизирующие \bar{E} , что приводит к уравнениям

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha_i} = 0.$$

Такой метод называется *прямым вариационным методом Рунца*. В качестве простого примера рассмотрим вычисление энергии основного состояния гармонического осциллятора ($\hbar, m, \omega = 1$)

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{p}^2 + x^2).$$

Среднее значение энергии

$$\bar{E}(\psi) = \frac{\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} [x^2 \theta^2(x) - \theta(x) \theta''(x)] dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} \theta^2(x) dx}.$$

Выбирая пробную функцию в виде

$$\theta(x, \alpha) = \text{ch}^{-1}(\alpha x), \quad (6.46)$$

получим

$$E(\alpha) = \frac{1}{12} \left(\frac{\pi^2}{2\alpha^2} + 2\alpha^2 \right).$$

Это выражение достигает минимума при $\alpha^2 = \pi/2$; соответствующее значение $\bar{E}(\alpha) = \pi/6 = 0,523$ мало отличается от точного значения: $\bar{E} = 1,05 \cdot E_0$. Другие примеры приведены в задачах к этой главе.

При вычислениях вариационным методом энергии возбужденных состояний следует учесть требование ортогональности

$$\int \theta_k(x, \alpha) \theta_m(x, \alpha) dx \quad (0 \leq k < m). \quad (6.47)$$

Иногда выполнение этого требования облегчается свойствами симметрии: например, основное состояние частицы в поле $U(x) = U(-x)$ описывается четной функцией, поэтому при нечетной $\theta_1(x, \alpha)$ требование (6.47) выполняется автоматически.

ВФ основного состояния при $x \rightarrow \pm\infty$ убывает (по модулю) не медленнее экспоненты; поэтому можно использовать (при большом числе связанных состояний в поле) в качестве ВФ первых возбужденных состояний систему полиномов, ортогональных с весом $\theta_0^2(x)$. Коэффициенты полиномов будут однозначно определяться требованием ортонормированности: поэтому точность результатов будет ухудшаться с ростом n .

Если $E_0^{(\alpha)}$ — значение энергии, вычисленное с помощью пробной функции $\varphi(x, \alpha)$, а пробная функция $\Phi(x; \alpha, \beta)$ такова, что при некоторых значениях β_0

$$\Phi(\alpha, \beta_0; x) = \varphi(\alpha; x),$$

то за счет расширения класса конкурирующих функций всегда будет выполняться неравенство

$$E_0^{(\alpha, \beta)} \leq E_0^{(\alpha)}.$$

Отметим, что отличие нормированной пробной функции от точной (квадрат нормы их разности в L_2) того же порядка, что и относительная точность СЗ, полученного вариационным методом.

11. Воспользовавшись прямым вариационным методом, найдем условия существования связанного состояния при одномерном движении в поле с четным потенциалом $U(x)$. Ограничения для этого потенциала будут получены ниже. Используем пробную функцию

$$\begin{aligned} \theta(x, \beta) &= 1 - \beta|x| & (\beta > 0, |x| \leq \beta^{-1}), \\ \theta(x, \beta) &= 0 & (|x| > \beta^{-1}). \end{aligned}$$

Тогда вариационный функционал (6.43) можно представить в виде

$$E(\beta) = \frac{3}{2}\beta \left[2\beta + 2 \int_0^{\beta^{-1}} U(x) (1 - \beta x)^2 dx \right]. \quad (6.48)$$

Если при $x \rightarrow 0$ $U(x) = o(x^{-1})$, то при $\beta \rightarrow \infty$ первый член в скобке неограниченно возрастает, а второй стремится к нулю. Поэтому при достаточно больших β $E(\beta) \approx 6\beta^2 > 0$. Выражение (6.48) можно переписать в виде

$$E(\beta) = \frac{3}{2}\beta \{ 2\beta + 2M_0 - 4\beta M_1 + 2\beta^2 M_2 - f(\beta) \};$$

где интегралы

$$M_k = \int_0^{\infty} U(x)x^k dx$$

предполагаются сходящимися. Тогда

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} f(\beta) = \lim_{\beta \rightarrow 0} \int_{\beta^{-1}}^{\infty} U(x) (1 - \beta x)^2 dx = 0.$$

Так как в точке $\beta = 0$ $E(\beta) = 0$, $E'(\beta) = 3M_0$, то при $M_0 < 0$ в некоторой окрестности точки $\beta = 0$ $E(\beta) < 0$. Из непрерывности $E(\beta)$ и ранее доказанной положительности $E(\beta)$ при больших β следует существование β_i таких, что

$$E(\beta_i) = 0. \quad (6.49)$$

Пусть β_1 — наименьший положительный корень (6.49); между двумя нулями $\beta = 0$, $\beta = \beta_1$ функция $E(\beta)$ отрицательна, а ее производная имеет по меньшей мере один нуль, соответствующий минимуму. Таким образом, верхняя граница энергии основного состояния отрицательна. Следовательно, в поле с четным потенциалом $U(x)$, удовлетворяющим условиям

$$M_0 < 0, \quad |M_1| < \infty, \quad |M_2| < \infty,$$

всегда существует связанное состояние.

12. Прямой вариационный метод связан с теорией возмущений. Из (6.10) следует, что вычисление поправки первого порядка к уровням дискретного спектра есть вычисление \bar{E} с ВФ невозмущенного уравнения в качестве пробной функции. Очевидно, это не наилучшая пробная функция.

Вычисление поправок второго и более высоких порядков в общем случае сводится к суммированию бесконечных рядов (6.16). Приближенное вычисление может быть проведено с помощью вариационного метода. Пусть

$$\hat{H}_0 \varphi_m = E_m \varphi_m.$$

Для определения СЗ гамильтониана $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ выберем пробную функцию в виде

$$\psi = \varphi_m + \chi_m,$$

где χ_m выберем ортогональной к φ_m ; этому условию можно удовлетворить, выбирая

$$\chi_m = \sum_{k \neq m} a_k \varphi_k.$$

Вычисляя среднюю энергию \bar{E} , получим

$$\bar{E}_m - E_m^{(0)} = E_m^{(1)} + 2\langle \varphi_m | \hat{V} | \chi_m \rangle + \frac{\langle \chi_m | \hat{H} - E_m^{(0)} | \chi_m \rangle}{1 + \|\chi_m\|}. \quad (6.50)$$

Опуская члены третьего и более высоких порядков малости, получим

$$\bar{E}_m = E_m^{(0)} + E_m^{(1)} + 2\langle \varphi_m | \hat{V} | \chi_m \rangle + \langle \chi_m | \hat{H} - E_m^{(0)} | \chi_m \rangle. \quad (6.51)$$

Условие стационарности правой части выражения (6.51), накладываемое вариационным принципом, приводит к уравнению

$$(\hat{H}_0 - E_m^{(0)})\chi_m + \hat{V}\varphi_m = E_m^{(1)}\varphi_m. \quad (6.52)$$

Сравнивая с формулой (6.8), находим, что $\chi_m = \psi_m^{(1)}$ — поправка первого порядка к ВФ. В тех случаях, когда решение (6.52) или, что то же самое, вычисление суммы (6.16) затруднительно, приближенное значение $E_m^{(2)}$ может быть получено минимизацией функционала в правой части (6.50).

13. Иногда для оценки СЗ системы с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{T} + \sum \hat{U}_i$ пробную функцию удобно выбрать в виде линейной комбинации СФ частей полного гамильтониана (например, СФ операторов $\hat{H}_i = \hat{T} + \hat{U}_i$). Такой подход называется *методом линейных комбинаций*. Положим

$$\theta_k = \sum_{i=1}^n a_{ki} \varphi_i^{(0)}(x).$$

Тогда

$$\bar{E}_k(a_{ki}) = \frac{\sum_i \sum_l a_{ki}^* a_{kl} H_{il}}{\sum_i \sum_l a_{ki}^* a_{kl} S_{il}},$$

где

$$H_{il} = \int \varphi_i^{(0)} \hat{H} \varphi_l^{(0)} dq, \quad (6.53)$$

$$S_{il} = \int \varphi_i^{(0)} \varphi_l^{(0)} dq. \quad (6.54)$$

Последний интеграл не обязательно равен δ_{il} . Пусть, например, $\hat{H} = \hat{T} + \hat{U}_1(x) + \hat{U}_2(x)$. Тогда функции $\psi_1^{(0)}$ и $\psi_2^{(0)}$, описывающие основные состояния систем с гамильтонианами $\hat{H}_1 = \hat{T} + \hat{U}_1$ и $\hat{H}_2 = \hat{T} + \hat{U}_2$, не имеют узлов и S_{12} заведомо не обращаются в нуль. Вариационные параметры находятся из условий стационарности \bar{E} :

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial a_i} = 0 \quad (1 \leq i \leq n).$$

Эти условия дают n однородных линейных уравнений

$$\sum_{l=1}^n (H_{il} - ES_{il}) a_l = 0. \quad (6.55)$$

Условие их совместности — равенство нулю детерминанта системы (6.55) — дает уравнение n -й степени, n действительных корней которого являются приближенными значениями энергии. Коэффициенты $a_{k1}, a_{k2}, \dots, a_{kr}$ определяются подстановкой E_k в (6.55) и дают ψ_k — ВФ состояния, обладающего энергией E_k .

Отметим, что если в качестве $\varphi_i^{(0)}$ использованы произвольные ортонормированные ВФ, соответствующие вырожденному с кратностью n состоянию с энергией E_0 , то

$$H_{ii} = E_0, \quad S_{ik} = \delta_{ik},$$

и условие совместности (6.55) приводит к секулярному уравнению (6.25) теории возмущений с вырождением.

Рассмотрим случай $n = 2$. Тогда уравнения (6.55) имеют вид

$$\begin{aligned} a_1 (H_{11} - ES_{11}) + a_2 (H_{12} - ES_{12}) &= 0, \\ a_1 (H_{12} - ES_{12}) + a_2 (H_{22} - ES_{22}) &= 0. \end{aligned}$$

Детерминант этой системы есть

$$\text{Det}(E) = (H_{11} - ES_{11})(H_{22} - ES_{22}) - (H_{12} - ES_{12})^2.$$

Введем обозначения:

$$E_1 = \frac{H_{11}}{S_{11}}, \quad E_2 = \frac{H_{22}}{S_{22}}, \quad E_2 > E_1.$$

Тогда

$$\frac{\text{Det}(E)}{S_{11}S_{22}} = (E_1 - E)(E_2 - E) - \frac{(H_{12} - ES_{12})^2}{S_{11}S_{22}}.$$

В силу неравенства Коши $S_{11}S_{22} \geq S_{12}^2$, поэтому при достаточно больших E $\text{Det}(E) > 0$, а при $E = E_1$ и $E = E_2$ $\text{Det}(E) < 0$. Следовательно, один из корней уравнения $\text{Det}(E) = 0$ лежит при $E < E_1$, т. е. ниже нижнего невозмущенного уровня, а другой — при $E > E_2$, т. е. выше верхнего невозмущенного уровня. Таким образом, учет возмущения методом линейных комбинаций приводит к отгалкиванию уровней.

14. Используем изложенные приближенные методы для решения задачи об одномерном движении частицы в поле с периодическим потенциалом $V(x)$. Рассмотрим случай сильной связи, когда ВФ частицы локализована вблизи минимумов потенциала $V(x)$.

Найдем уровни энергии частицы в поле с потенциалом

$$V(x) = \sum_n U(x - na),$$

считая известными СФ и дискретные СЗ уравнения

$$\hat{H}_0 \varphi_m = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi_m}{\partial x^2} + U(x) \varphi_m = E_m \varphi_m.$$

Пусть E_0 — энергия одного из уровней гамильтониана \hat{H}_0 . Используем метод линейных комбинаций. Выберем пробную функцию в виде

$$\psi(x) = \sum_n A_n \varphi(x - na). \quad (6.56)$$

Функции $\varphi(x - na)$ удовлетворяют уравнениям

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \varphi''(x - na) + U(x - na) \varphi(x - na) = E_0 \varphi(x - na).$$

Используя равенство (6.55), получаем систему уравнений

$$\sum_n A_n (H_{mn} - E S_{mn}) = 0. \quad (6.57)$$

В силу периодичности потенциала интегралы перекрытия S_{mn} зависят только от разности $m - n$. Матричные элементы H_{mn} удобно представить в виде

$$H_{mn} = E_0 S_{m-n} + h_{m-n},$$

где введено обозначение

$$h_{m-n} = \int \varphi(x - ma) \sum_{n' \neq n} U(x - na) \varphi(x - na) dx.$$

Таким образом, система (6.57) принимает вид

$$\sum_n A_n [h_{m-n} - (E - E_0) S_{m-n}] = 0. \quad (6.58)$$

Поскольку потенциал $V(x)$ периодический, можно потребовать, чтобы пробная ВФ $\psi(x)$ удовлетворяла теореме Блоха (см. п. 2.12):

$$\psi(x + ma) = e^{ikma} \psi(x).$$

Для этого должны выполняться равенства

$$A_n = A e^{ikna}. \quad (6.59)$$

Тогда из формулы (6.58) следует:

$$E = E_0 + \frac{\sum_p h_{|p|} e^{ikap}}{\sum_p S_p e^{ikap}}; \quad (6.60)$$

здесь введен новый индекс суммирования $p = n - m$.

Если период потенциала a больше характерной длины спада функции $\varphi(x)$, то с ростом $|p|$ значения h_p и S_p быстро убывают. Это и соответствует предположению о сильной связи. Учитывая, что $S_0 = 1$, и пренебрегая S_p при $|p| \geq 1$ и h_p при $|p| > 1$, получим выражение для энергетического спектра

$$E(k) = E_0 + h_0 + 2h_1 \cos ka.$$

Таким образом, в случае сильной связи энергетический уровень одиночной ямы E_0 превращается в зону ширины $4h_1$, расположенную в окрестности уровня одиночной ямы.

15. Рассмотрим задачу об одномерном движении частицы в поле с периодическим потенциалом в случае слабой связи, когда в качестве ВФ нулевого приближения можно использовать ВФ свободного движения.

Развитые в этой главе методы непригодны для определения СФ и СЗ непрерывного спектра. Поэтому мы воспользуемся пространственным приемом, позволяющим заменить непрерывный спектр дискретным. Потребуем, чтобы исходная ВФ свободного движения удовлетворяла требованию периодичности

$$\psi(x + Na) = \psi(x)$$

и была нормирована на единицу в интервале $0 \leq x \leq Na$. Тогда

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{Na}} e^{ikx}. \quad (6.61)$$

Возможные значения k определяются из условия периодичности

$$k_n = \frac{2\pi}{Na} n \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots). \quad (6.62)$$

Таким образом, возможные значения k дискретны, дискретным становится и невозмущенный энергетический спектр

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}. \quad (6.63)$$

Теперь для определения энергетического спектра в поле можно использовать теорию возмущений. Это и соответствует предположению о слабой связи. Учитывая поправки к энергии до второго порядка, получаем

$$E_n = E_n^{(0)} + \frac{1}{Na} \int_0^{Na} e^{-ik_n x} V(x) e^{ik_n x} dx + \sum_{k \neq q} \frac{|\langle q | \hat{V} | k \rangle|^2}{E_0(k) - E_0(q)}. \quad (6.64)$$

Поправка первого порядка ко всем уровням одинакова. В пределе при $N \rightarrow \infty$ она не зависит от N и есть просто среднее значение

потенциала

$$E_n^{(1)} = \bar{U} = \frac{1}{a} \int_{-\infty}^{+\infty} U(x) dx.$$

Выражение (6.64) применимо, если разности энергий в знаменателе третьего члена не малы по сравнению с соответствующими матричными элементами в числителе. В силу периодичности потенциала $V(x)$ входящие в выражение для поправки второго порядка матричные элементы

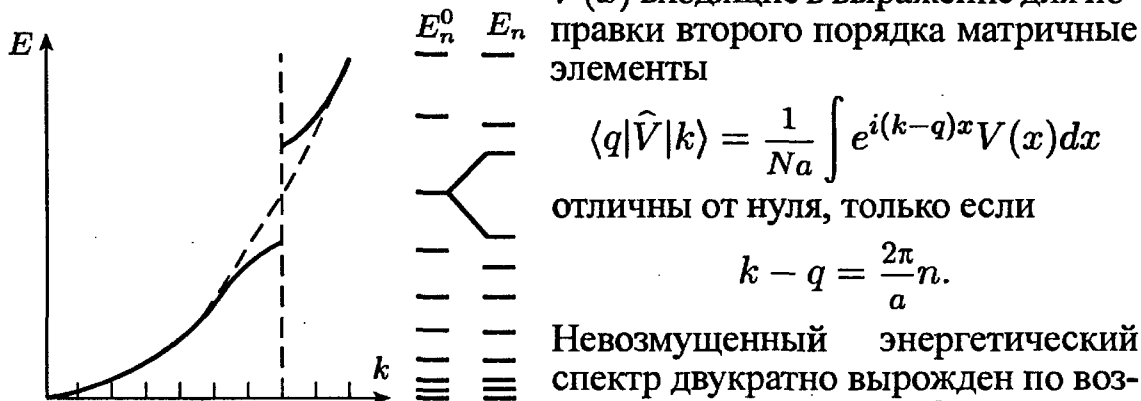


Рис. 19

отличны от нуля, только если $k - q = \frac{2\pi n}{a}$. Невозмущенный энергетический спектр двукратно вырожден по возможным значениям k . Поэтому выражение (6.64) заведомо теряет применимость в окрестности точек $k = \pi n/a$. Возмущенное значение энергии в окрестности этих точек можно определить с помощью теории возмущений для двукратно вырожденного уровня. Пренебрегая всеми матричными элементами, кроме $\langle k - 2\pi n/a | \hat{V} | k \rangle$, при k , близком к $\pi n/a$, получаем

$$E_k^{\pm} = \frac{1}{2} \left[(E_k + E_q) \pm \sqrt{(E_k - E_q)^2 + 4V_{kq}^2} \right]. \quad (6.65)$$

Дискретный спектр как функция n в невозмущенном и возмущенном случаях изображен на рис. 19. При значениях $k_n = \pi n/a$ в дискретном спектре (квазинепрерывном при больших N) возникает запрещенная зона ширины $\Delta_n = 2V_{k_n q_n}$. Отметим, что с возрастанием n размеры запрещенных зон убывают.

ЗАДАЧИ

1. Вычислить, ограничиваясь первым порядком теории возмущений, спектр s -состояний в экранированном кулоновском потенциале

$$U(r) = -\frac{e^2}{r} e^{-r/\lambda}$$

при $\lambda \gg a_0$. Оценить максимальное n , при котором применима теория возмущений.

2. Найти поправку первого порядка к энергии основного состояния атома водорода с учетом конечности размеров ядра. Ядро полагать однородно заряженным шаром

радиуса R . Оценить границы применимости результата для мезоатомов, в которых один из электронов заменен μ -мезоном ($m_\mu \approx 207m_e$, $R \approx A^{1/3} \cdot 1,25 \cdot 10^{-13}$ см, где A — число нуклонов).

3. Вычислить поправку первого порядка к уровням энергии гармонического осциллятора ($\hbar, m, \omega = 1$) при наличии возмущения $\hat{V} = \epsilon x^4$.

4. Показать, что для частицы в s -состояниях в кулоновском поле центробежный потенциал нельзя рассматривать как возмущение при

$$E_n^{(1)} \ll E_n^{(0)}.$$

Указание. В области выполнения неравенства сравнить результаты с разложением точного решения.

5. Вычислить поправки первого и второго порядков к уровням энергии гармонического осциллятора ($\hbar, m, \omega = 1$) при наличии возмущения $\hat{V} = \epsilon x^2$. Сравнить с разложением точного решения. Оценить радиус сходимости ряда.

6. Найти поправку второго порядка к энергии основного состояния атома водорода в однородном электрическом поле.

Указание. Решить уравнения для поправки первого порядка к волновой функции $\psi^{(1)}$.

7. Найти поправку первого порядка к СЗ эрмитовой матрицы \hat{H}_0 при наличии возмущения $\epsilon \hat{V}$:

$$\hat{H}_0 = \begin{vmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{vmatrix}, \quad \epsilon \hat{V} = \epsilon \begin{vmatrix} p & q \\ q^* & r \end{vmatrix}.$$

Сравнить с разложением точного решения.

В условиях задач 6.8–6.12 использованы следующие обозначения: E_0, E_1 — энергии основного и первого возбужденного состояний, E_k^+, E_k^- — оценки сверху и снизу, $\theta(x, \alpha)$ — пробная функция.

8. Используя $\theta(x, \alpha) = x \operatorname{ch}^{-1}(\alpha x)$, найти E_1^+ для гармонического осциллятора, положив $\hbar, m, \omega = 1$. Проверить выполнение теоремы вириала.

9. Найти E_0^+ для гармонического осциллятора, используя

а) $\theta_1(x, \alpha) = e^{-\alpha|x|}$;

б) $\theta_2(x, \alpha) = 1 - \alpha|x| \quad (|x| < \alpha^{-1})$;

в) $\theta_3(x, \alpha) = (1 + \alpha x^2) e^{-x^2}$.

Указание. При вычислении \bar{E} с пробными функциями $\theta_1(x)$ и $\theta_2(x)$ учесть разрывность $\theta'(x)$ при $x = 0$.

10. Вычислить E_0^+ для гармонического осциллятора, используя

$$\theta(x, \alpha, \beta) = e^{-\alpha|x|} \cos \beta x.$$

Указание. Уравнения для параметров α, β удобно решать методом итераций, приняв в качестве нулевого приближения для α значение, полученное в задаче 6.9, а).

11. Используя неравенство (6.45) и пробную функцию (6.46), найти E_0^- для гармонического осциллятора.

12. Доказать неравенство

$$E_0 \geq \bar{E} - \frac{\overline{E^2} - \bar{E}^2}{E_1 - \bar{E}}.$$

Указание. Рассмотреть интеграл

$$K = \int \psi^* (\hat{H} - E_0) (\hat{H} - E_1) \psi dx.$$

13. Используя вариационный метод, решить задачу 3.8.

14. Доказать, что с ростом l энергия наинизшего связанного состояния частицы в центральном поле с моментом l возрастает.

15. Вычислить энергию основного состояния ангармонического осциллятора ($\epsilon \ll 1$)

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{p}^2 + x^2 + \epsilon x^4),$$

используя пробную функцию $\theta(x, \alpha) = e^{-\alpha x^2}$, с точностью до ϵ^2 . Сравнить с результатом задачи 6.3.

16. Доказать следующую формулу:

$$E_m^{(3)} = \langle \psi_m^{(1)} | \hat{V} | \psi_m^{(1)} \rangle - V_{mm} \langle \psi_m^{(1)} | \psi_m^{(1)} \rangle,$$

используя для определения $E^{(n)}$ теорию возмущений Бриллюэна–Вигнера.

17. Найти поправки первого и второго порядков к энергии уровня в поле

$$U(x) = -q\delta(x)$$

при наличии возмущения

$$V(x) = \epsilon V_0 \frac{a^2}{x^2 + a^2}.$$

КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

0. Рассмотрим метод отыскания приближенных СЗ и СФ для одномерного уравнения Шредингера, носящий название *квазиклассического приближения* или *метода ВКБ* — по именам Вентцеля, Крамерса и Бриллюэна. В этом приближении дискретный энергетический спектр появляется как множество тех значений E_n , при которых определенный функционал, зависящий от E , принимает значения из заданного набора (см. п. 1.0).

1. Рассмотрим одномерное УШ для стационарных состояний

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dy^2} + U(y)\psi = E\psi \quad (7.1)$$

с потенциалом вида $U(y) = U_0 f(y/a)$. Вводя безразмерные параметры (см. п. 3.3)

$$\xi^2 = \frac{1}{B} = \frac{\hbar^2}{2mU_0a^2}, \quad x = \frac{y}{a}, \quad \eta = \frac{E}{U_0},$$

мы перепишем (7.1) в виде

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{\xi^2} r(x)\psi = 0, \quad (7.2)$$

где

$$r(x) = \eta - f(x).$$

Подставив в (7.2) решение вида

$$\psi(x) = \exp\left[\frac{i}{\xi} \int_a^x q(x) dx\right], \quad (7.3)$$

получим для $q(x)$ нелинейное уравнение Риккати

$$i\xi \frac{dq}{dx} + r(x) - q^2 = 0. \quad (7.4)$$

Решение уравнения (7.4) мы будем искать в виде асимптотического ряда по степеням ξ , полагая ξ малым:

$$q(x) = \sum (-i\xi)^n q_n(x). \quad (7.5)$$

Подставляя (7.5) в (7.4), приходим к рекуррентным уравнениям

$$\frac{dq_{n-1}}{dx} = - \sum_{v=0}^n q_v q_{n-v} \quad (n > 1).$$

С точностью до членов второго порядка по ξ

$$q(x) = q_0 - i\xi q_1 - \xi^2 q_2. \quad (7.6)$$

Здесь

$$q_0(x) = \pm \sqrt{r(x)} = \pm \frac{\sqrt{2m[E - U(x)]}}{\sqrt{2mU_0}}.$$

Последняя формула есть классическое выражение для импульса частицы с энергией E в поле $U(x)$ (в единицах $\sqrt{2mU_0}$). Мы сохраним за этой величиной название и обозначение импульса

$$q_0 = p(x) = \sqrt{\eta - f(x)}, \quad (7.7)$$

так как в этой главе оператор импульса \hat{p} не используется. Следующие члены разложения (7.6):

$$\begin{aligned} q_1(x) &= -\frac{q_0'}{2q_0} = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \ln |p(x)|, \\ q_2(x) &= -\frac{q_1' + q_1^2}{2q_0}. \end{aligned} \quad (7.8)$$

Разложение (7.5) представляет собой, вообще говоря, расходящийся ряд. Первые члены его дают хорошее приближение для $q(x)$, если

$$|q_0(x)| \gg \xi |q_1(x)|. \quad (7.9)$$

Условие (7.9) заведомо не выполняется вблизи точек x_k таких, что

$$q_0(x_k) = \pm p(x_k) = 0.$$

В классическом случае при действительных x_k частица меняет направление движения на противоположное; эти точки называются *точками поворота*. Функции, полученные подстановкой (7.7) и (7.8) в (7.3):

$$\psi_k^\pm = \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \exp \left[\pm \frac{i}{\xi} \int_{x_k}^x p(x) dx \right], \quad (7.10)$$

мы будем называть *ВКБ-решениями* УШ; общее решение в области, где выполняется условие (7.8), имеет вид

$$\psi(x) = a_+ \psi_k^{(+)} + a_- \psi_k^{(-)}. \quad (7.11)$$

В дальнейшем безразмерную величину ξ мы будем включать в $p(x)$. Индексы $+$ и $-$ будем называть знаками $\psi_k(x)$.

2. Рассмотрим случай дискретного спектра УШ. Нам требуется найти решения $\psi(x)$ во всей области их определения и соответствующие собственные значения энергии E_n . Поскольку решение (7.10) заведомо не существует в точках поворота, то задача отыскания решений сводится к установлению формул связи — правил сопоставления

ВКБ-решений, взятых по разные стороны от точек поворота

$$\psi(x < x_k) \rightarrow \psi(x > x_k).$$

Рассмотрим решение (7.11) в плоскости комплексного x и движение в поле с потенциалом $U(x)$ с энергией E такой, что импульс действителен между двумя точками x_1 и x_2 (рис. 20). Область значений x на действительной оси, в которой импульс $p(x)$ действителен, называется *классически доступной областью*. Точки x_1, x_2 являются точками ветвления функции $p(x)$; проводя между точками поворота разрез, выберем знаки p на берегах разреза, как показано на рис. 20. Вблизи точек поворота решения неаналитичны; при обходе вокруг точки x_1 по контуру C_1

$$\begin{aligned} p(x) &\rightarrow \exp(i\pi)p(x), \\ \psi_1^+(x) &\rightarrow \exp\left(-i\frac{\pi}{2}\right)\psi_1^-(x), \quad \psi_1^-(x) \rightarrow \exp\left(-i\frac{\pi}{2}\right)\psi_1^+(x). \end{aligned} \quad (7.12)$$

Неаналитичность ВКБ-решений в точках x_k есть следствие выбранного приближения. Из (7.11) и (7.12) видно, что даже общее выражение (7.11) с постоянными коэффициентами a_k не является асимптотикой решения во всей плоскости комплексного x .

Для того, чтобы решение вида (7.11) было асимптотически правильным во всей плоскости x , коэффициенты a_+, a_- должны меняться скачком при переходе через линии Стокса (такое поведение коэффициентов называется *явлением Стокса*). *Линией Стокса* решения ψ_k^\pm называется контур на комплексной плоскости, для точек которого

$$\operatorname{Re} \int_{x_k}^x p(x) dx = 0$$

и знак мнимой части совпадает со знаком ψ_k . На линии Стокса для ψ_k^\pm эта функция экспоненциально мала. Скачок коэффициента при экспоненциально малой функции не приведет к ухудшению асимптотики.

Мы потребуем, чтобы асимптотическое решение (7.11) было однозначным во всей плоскости x . Будем искать формулы связи при переходе через линии Стокса в виде

$$\begin{aligned} a_+ &\rightarrow a_+ + \alpha a_-, \\ a_- &\rightarrow a_- + \beta a_+. \end{aligned} \quad (7.13)$$

Коэффициенты α, β называются *параметрами Стокса*. Направление

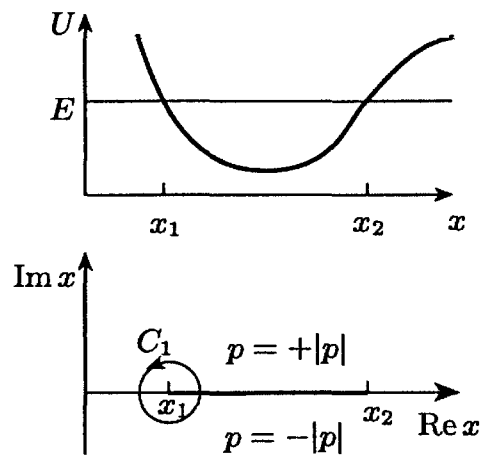


Рис. 20

линий Стокса определится условиями:

$$\psi_k^+ : \arg \left[-i \int_{x_k}^x p(x) dx \right] = 2\pi n, \quad (7.14)$$

$$\psi_k^- : \arg \left[+i \int_{x_k}^x p(x) dx \right] = 2\pi n. \quad (7.15)$$

Угол φ , определяющий направление линий Стокса, будем отсчитывать от положительного направления оси x .

Найдем положение линий Стокса. Вблизи x_k их можно считать прямыми

$$p(x) \approx A\sqrt{x-x_1} \approx \sqrt{r} \exp\left(i\frac{\varphi}{2}\right),$$

$$\int_{x_k}^x p(x) dx \approx r^{3/2} \exp\left(i\frac{3\varphi}{2}\right).$$

Используя условие (7.14), получим

$$\frac{3\varphi}{2} - \frac{\pi}{2} = 2\pi n; \quad \varphi_1^{+1} = \frac{\pi}{3}, \quad \varphi_1^{+2} = \frac{5\pi}{3}.$$

Из условия (7.15) для линии $[-]$ имеем

$$\frac{3\varphi}{2} + \frac{\pi}{2} = 2\pi n; \quad \varphi_1^- = \pi.$$

Мы выбираем решения, для которых $\varphi \in [0, 2\pi]$. Аналогично, вблизи точки x_2 , выбирая в интервале $\varphi \in [-\pi, \pi]$, найдем

$$\varphi_2^{+1} = \frac{2\pi}{3}, \quad \varphi_2^{+2} = -\frac{2\pi}{3},$$

$$\varphi_2^- = 0.$$

Направления линий Стокса показаны на рис. 21.

Параметры Стокса α, β, γ для линий, выходящих из точки x_1 , найдем, совершив обход вокруг этой точки. Используя формулы (7.13) и

правило перехода через разрез (7.12), получаем

$$a_+ \psi_+ + a_- \psi_- = [a_- + \beta(a_+ + \alpha a_-)] \exp(-i\pi/2) \psi_+ +$$

$$+ \{a_+ + \alpha a_- + \gamma[a_- + \beta(a_+ + \alpha a_-)]\} \exp(-i\pi/2) \psi_-.$$

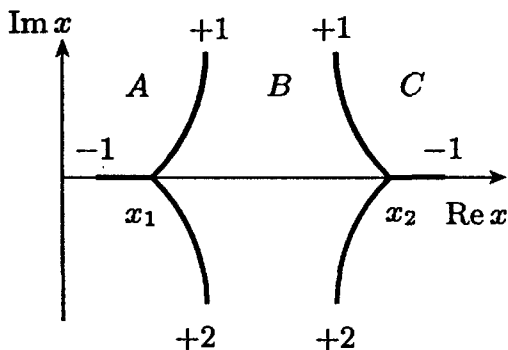


Рис. 21

Приравнивая коэффициенты при ψ_+ , ψ_- , находим

$$\alpha = \beta = \gamma = \exp\left(i\frac{\pi}{2}\right).$$

Подчеркнем, что эти значения параметров Стокса относятся к случаю простого нуля функции $r(x)$.

Построим теперь общее решение. В области A физическое экспоненциально убывающее решение дается функцией ψ_1^- . В области B решение определяется переходом через линию $[+1]_1$ и может быть выражено как через ψ_1^\pm , так и через ψ_2^\pm :

$$\psi_B = \psi_1^- + \exp\left(-i\frac{\pi}{2}\right)\psi_1^+ = \exp(-i\omega)\psi_2^- + \exp\left(-i\frac{\pi}{2}\right)\psi_2^+ \exp(i\omega).$$

Здесь введено обозначение

$$\omega = \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx.$$

В области C решение также должно убывать экспоненциально. Используя выражение ψ_B через ψ_2^\pm и совершая переход через линию $[+1]_2$, в области C находим

$$\psi_C = \exp(-i\omega)\psi_2^- + \left(\exp\left(-i\frac{\pi}{2} + i\omega\right) + \exp\left(-i\frac{\pi}{2} - i\omega\right)\right)\psi_2^+.$$

Требую обращения в нуль коэффициента при растущей функции ψ_2^+ :

$$\exp\left(-i\frac{\pi}{2}\right)(\exp(i\omega) + \exp(-i\omega)) = 0,$$

приходим к равенству

$$\omega = \pi(n + 1/2). \quad (7.16)$$

Действительное решение, экспоненциально убывающее в области A ,

$$\psi_A = \psi_1^- \exp\left(i\frac{\pi}{4}\right) = \frac{1}{\sqrt{|p|}} \exp\left(-\left|\int_{x_1}^x p(x) dx\right|\right),$$

приводит в области B к решению вида

$$\psi_B = \frac{1}{\sqrt{|p|}} \cos\left(\int_{x_1}^x p(x) dx - \frac{\pi}{4}\right). \quad (7.17)$$

Отметим, что все предыдущие рассуждения относились к случаю, когда импульс действителен только между двумя точками поворота.

3. Полученное из формул связи соотношение (7.16) в обычных единицах имеет вид

$$\int_{x_1}^{x_2} p(x) dx = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (7.18)$$

Это есть *правило квантования Бора–Зоммерфельда*, известное из старой квантовой теории. Значения E_n , вычисленные с помощью этой формулы, мы будем называть *ВКБ-спектром*.

В тех случаях, когда дискретный спектр гамильтониана удастся определить точно, между точными СЗ E_n и вычисленными методом ВКБ значениями E'_n можно установить соотношение

$$E'_n = E_n \left[1 + O\left(\frac{1}{n}\right) \right]. \quad (7.19)$$

Таким образом, значения ВКБ-спектра дают хорошее приближение для высоких уровней.

Собственные значения уравнения (7.1) могут быть представлены в виде

$$E_n = E'_n + \xi^2 \mu_n + o(\xi^2). \quad (7.20)$$

Выражение для μ_n было найдено Масловым*. Если в окрестности минимума потенциала $U(x)$ величина $f''(x) = 0$, то при малых n

$$E'_n = O(\xi), \quad \mu_n = O(1).$$

Таким образом, формула Бора–Зоммерфельда дает хорошее приближение и для низколежащих уровней, если

$$\xi^2 \ll 1. \quad (7.21)$$

Неравенство (7.21) является условием квазиклассичности потенциала $U(x)$ в смысле близости точного и ВКБ-спектров при любых значениях n . Приближение ВКБ называется квазиклассическим потому, что при выполнении условия (7.21) квантовый масштаб действия \hbar мал по сравнению с величиной $S = \sqrt{2mU_0}a^2$, характеризующей потенциал. Заметим, что рассмотрение потенциальной ямы в пределе, противоположном квазиклассическому ($\xi^2 \gg 1$), приводит к задаче о δ -яме, рассмотренной в гл. 3.

Рассмотрим потенциальную яму $U(x)$ такую, что $U(x) < 0$, $U_+ = U_- = 0$. Тогда с ростом энергии точки поворота будут удаляться на бесконечность. Номер наивысшего связанного состояния \mathcal{N} определится из условия

$$\mathcal{N} \leq \frac{1}{\pi \xi} \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{|f(x)|} dx - \frac{1}{2}. \quad (7.22)$$

Эта формула дает оценку для числа связанных состояний. Отметим, что $\mathcal{N} \sim \xi^{-1}$. Неравенство Баргмана (5.50) можно при $l = 0$ рассматривать как оценку для числа связанных состояний с четной ВФ в четном потенциале $U(x)$. Поскольку уровни различной четности чередуются, то

$$\mathcal{N} \leq 2 + \xi^{-2} \int_0^{\infty} |f(x)| x dx. \quad (7.23)$$

Это неравенство дает оценку $\mathcal{N} \sim \xi^{-2}$; для квазиклассического случая ($\xi^2 \ll 1$) оценка (7.22) значительно лучше. Отметим, что интегралы в правых частях (7.22) и (7.23) сходятся при одинаковых условиях: при $x \rightarrow \infty$ $|f(x)| = o(x^{-2})$, при $x \rightarrow 0$ $f(x) = o(x^{-1})$.

Величина в левой части равенства

$$\oint p dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (7.24)$$

определяет объем фазового пространства, охваченный классической траекторией. Поэтому, основываясь на равенстве (7.24), говорят, что одному связанному состоянию в фазовом пространстве соответствует объем $2\pi\hbar$ на одну степень свободы.

4. Рассмотренные выше ВКБ-решения для дискретного спектра не были нормированы. Рассмотрим нормированные ВКБ-функции для состояний дискретного спектра с большими n . Так как вне классически доступной области ВФ экспоненциально убывает, то основной вклад в нормировочный интеграл будет вносить область между точками поворота. Можно потребовать, чтобы

$$A^2 \int_{x_1}^{x_2} \psi_B \psi_B^* dx = 1,$$

где A — нормировочная постоянная, а ψ_B определяется формулой (7.17):

$$1 = A_n^2 \int_{x_1}^{x_2} p^{-1}(x) \cdot \cos^2 \left[\int_{x_1}^x p(x) dx - \frac{\pi}{4} \right] dx.$$

При больших n можно заменить быстро осциллирующий квадрат косинуса его средним значением. Таким образом, находим

$$A_n^2 = 2 \left[\int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{p_n} \right]^{-1}. \quad (7.25)$$

Вблизи точек поворота нормированная плотность вероятности в квазиклассическом приближении имеет вид

$$w(x) = \psi^* \psi \approx \frac{1}{\sqrt{E - U(x)}} \left[\int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\sqrt{E - U(x)}} \right]^{-1}.$$

Определим теперь классическую функцию распределения вероятностей в одномерном случае $W(x)$ следующим образом: $W(x)dx$ есть отношение времени, в течение которого частица находится в интервале dx , к периоду движения. Тогда

$$W(x) = \frac{1}{\sqrt{E - U(x)}} \left[\int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\sqrt{E - U(x)}} \right]^{-1}.$$

Таким образом, вблизи точек поворота в классически доступной области ВКБ-функция распределения $w(x)$ стремится к классической функции распределения $W(x)$.

В рассматриваемом нами случае больших n существует связь между величиной нормировочных постоянных A_n и видом энергетического спектра $E(n)$. Дифференцируя выражение (7.18) по n , получаем

$$\pi \hbar = \int \frac{dp_n}{dn} dx = \int \frac{dp_n}{dE_n} \frac{dE_n}{dn} dx. \quad (7.26)$$

Так как по определению

$$p^2 = 2m[E_n - U(x)],$$

то

$$\frac{dE_n}{dp} = \frac{p}{m}.$$

Таким образом, равенство (7.26) принимает вид

$$\pi \hbar = m \frac{dE_n}{dn} \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{p}. \quad (7.27)$$

Интегралы в правых частях (7.25) и (7.27) совпадают. В итоге приходим к соотношению

$$A_n^2 = \frac{2m}{\pi \hbar} \frac{dE_n}{dn}, \quad (7.28)$$

связывающему нормировочный коэффициент ВКБ-решений со свойствами спектра.

5. Рассмотрим ВКБ-решения УШ для состояний непрерывного спектра. Пусть частица находится в поле потенциального барьера

$U(x)$ с энергией, меньшей максимального значения U (рис. 22). Такой случай соответствует задаче о подбарьерном прохождении.

Пусть при $x > x_k$ $p(x) = |p(x)|$. Тогда импульс $p(x)$ можно представить в виде

$$p(x) = C(x)\sqrt{(x-x_1)(x-x_2)}.$$

Здесь $C(x)$ — функция без нулей.

Найдем направления линий Стокса из точек x_1 и x_2 . У точки поворота x_1

$$p(x) \approx C_1\sqrt{(x-x_1)\exp(i\pi)(x_2-x)} \sim C_1\sqrt{r}\exp\left(i\left(\frac{\pi}{2} + \frac{\varphi}{2}\right)\right),$$

$$\int_{x_1} p(x) dx \approx r^{3/2}\exp\left(i\left(\frac{\pi}{2} + \frac{3\varphi}{2}\right)\right).$$

Отсюда находим направления линий Стокса:

$$\begin{aligned} \varphi_1^{+1} &= 0, & \varphi_1^{+2} &= \frac{4\pi}{3}, \\ \varphi_1^{-1} &= \frac{2\pi}{3}, & \varphi_1^{-2} &= 2\pi. \end{aligned}$$

У точки поворота x_2 импульс $p(x)$ можно представить в виде

$$p(x) \approx C_2\sqrt{x-x_2} \sim C_2\sqrt{r}e^{i\varphi/2}.$$

Направления линий Стокса в точке x_2 : $\text{Im } x$

$$\begin{aligned} \varphi_2^{+1} &= \frac{\pi}{3}, & \varphi_2^{+2} &= -\pi, \\ \varphi_2^{-1} &= -\frac{\pi}{3}, & \varphi_2^{-2} &= \pi. \end{aligned}$$

Направления линий Стокса показаны на рис. 22.

При решении одномерного УШ для состояний непрерывного спектра мы отыскивали решения, асимптотиками которых при $x \rightarrow \pm\infty$ являлись ВФ свободного движения — одномерные волны $\exp(ikx)$. ВКБ-решения аналогичны ВФ свободного движения на сопряженных линиях Стокса — линиях, на которых

$$\text{Im} \int_{x_k}^x p(x) dx = 0. \tag{7.29}$$

В нашем случае сопряженные линии Стокса совпадают с лучами вдоль действительной оси $x > x_2$ и $x < x_1$.

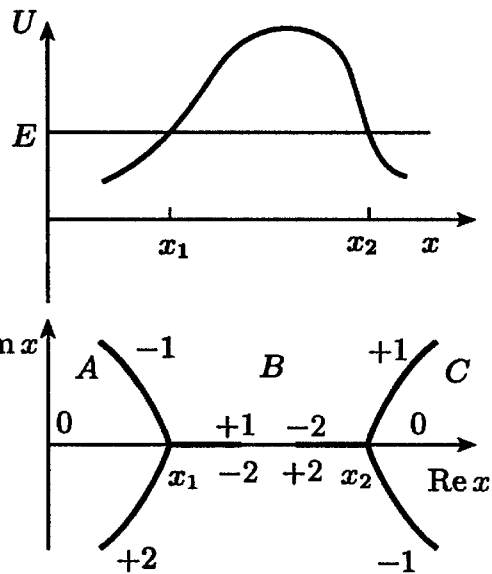


Рис. 22

Направление потока вероятности на сопряженных линиях Стокса определяется следующим *правилом Хединга*. Если решения ψ_k^+ , ψ_k^- убывают в верхней полуплоскости, то на сопряженных линиях Стокса они описывают поток вправо. Так, при $x > x_2$ волне, распространяющейся вправо, соответствует ψ_2^+ : в области C , ограниченной осью x и линией Стокса $[+1]$, решение ψ_2^+ убывает (по определению решение ψ_2^+ экспоненциально мало на линии $[+1]$).

Установим формулы связи между ВКБ-решениями в областях A и C :

$$\begin{aligned}\psi_C &= \psi_2^+, \\ \psi_B &= \psi_2^+ = \psi_1^+ \exp \left[i \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx \right] = \psi_1^+ e^K, \\ \psi_A &= e^K \psi_1^+ + e^{i\pi/2+K} \psi_1^-.\end{aligned}$$

Так как в области A $p(x) = e^{i\pi}|p(x)|$, то решения, представляющие в этой области простые волны, даются формулами

$$\psi_{1L} = e^{-i\pi/2} \psi_1^+, \quad \psi_{1R} = e^{-i\pi/2} \psi_1^-.$$

Используя эти выражения, находим формулу связи

$$\psi_1^+ + e^{-i\pi/2} \psi_1^+ \leftarrow e^{-K} \psi_2^+. \quad (7.30)$$

Физическая интерпретация формулы связи (7.30) очевидна. В области C существует только поток вправо (распространение частицы, прошедшей за барьер). В области A существуют потоки вправо и влево, соответствующие падающей и отраженной частице. По определению, данному в п. 3.3, находим ВКБ-выражение для коэффициента прохождения:

$$D(E) = \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} \left| \sqrt{2m(E - U(x))} \right| dx \right]. \quad (7.31)$$

6. Рассмотрим ВКБ-решение в непрерывном спектре при $E > U_0$. В этом случае на действительной оси точки поворота отсутствуют. Мы ограничимся рассмотрением простейшего случая, когда уравнение для точек поворота

$$p(x) = 0$$

имеет два комплексно-сопряженных корня (рис. 23):

$$x_1 = \alpha + i\beta, \quad x_2 = \alpha - i\beta.$$

Точки x_1 , x_2 мы будем называть комплексными точками поворота. Проводя между точками поворота разрез и полагая

$$x = \alpha + i\zeta, \quad dx = e^{i\pi/2} d\zeta,$$

запишем выражение для импульса вблизи точек поворота:

$$p(x) = A(x)\sqrt{(x - x_1)(x - x_2)}, \quad (7.32)$$

где $A(x)$ — действительная функция без нулей. Положим $p(z) = |p(z)|$ на правом берегу разреза; угол φ будем отсчитывать от положительного направления мнимой оси. Тогда вблизи x_1

$$\zeta - \beta = |\zeta - \beta|e^{i\varphi},$$

$$x - x_1 = e^{i\pi/2}(\zeta - \beta).$$

Учитывая (7.32), можно записать

$$p(x) \approx A_1\sqrt{r}e^{i(\pi/2+\varphi/2)},$$

$$\int_{x_1} p(x) dx \approx r^{3/2}e^{i(\pi+3\varphi/2)}.$$

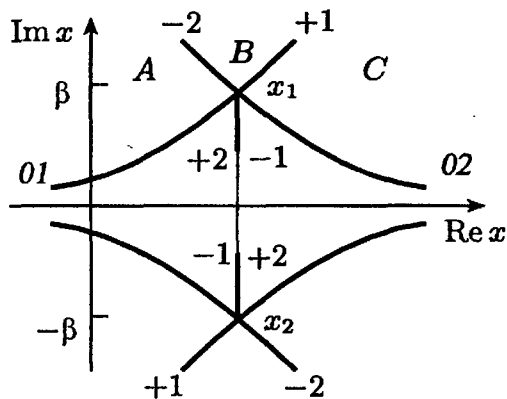


Рис. 23

Отсюда направление линий Стокса у точки x_1 будет:

$$\varphi_1^{+1} = -\frac{\pi}{3}, \quad \varphi_1^{+2} = \pi, \quad \varphi_1^{-1} = -\pi, \quad \varphi_1^{-2} = \frac{\pi}{3}.$$

У точки x_2 аналогично находим

$$\varphi_2^{+1} = \frac{2\pi}{3}, \quad \varphi_2^{+2} = 2\pi, \quad \varphi_2^{-1} = 0, \quad \varphi_2^{-2} = \frac{4\pi}{3}.$$

Сопряженные линии Стокса выходят из точки x_1 под углами

$$\varphi_1^{01} = \frac{2\pi}{3}, \quad \varphi_1^{02} = -\frac{2\pi}{3}$$

и лишь асимптотически приближаются к действительной оси при $x \rightarrow \pm\infty$. Расположение линий Стокса [+], [-] и сопряженных линий Стокса {0} показано на рис. 23. Рассмотрим формулы связи для ВКБ-решений на 01 и на 02:

$$\psi_C = \psi_0^+, \quad \psi_B = \psi_0^+, \quad (7.33)$$

$$\psi_A = \psi_0^+ + e^{i\pi/2}\psi_0^-.$$

По правилу Хединга на 02 функция ψ_0^+ соответствует потоку вправо, ψ_0^- — потоку влево, на 01 направления обратные. Деформируем контур интегрирования для x , далеких от α , придвинув контур к действительной оси и разрезу (рис. 24). Тогда

$$i \int_{x_1}^x p dx \approx i \int_{x_1}^{\alpha} p dx + i \int_{\alpha}^x p dx. \quad (7.34)$$

Положим

$$k = \text{Im} \left[- \int_{x_3}^{x_1} p(x) dx \right].$$

Тогда на левом берегу разреза первый из интегралов в правой части (7.34) есть $-k/2$ и

$$\begin{aligned} \psi_0^+ &\approx e^{-k/2 + i\pi/2} \psi_L^+, \\ \psi_0^- &\approx e^{-k/2 - i\pi/2} \psi_R^-, \end{aligned} \quad (7.35)$$

$$\psi_0^+ \approx e^{-k/2} \psi_R^+,$$

где введено обозначение

$$\psi_{R,L}^\pm = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[\pm i \int_{\alpha}^x p(x) dx \right],$$

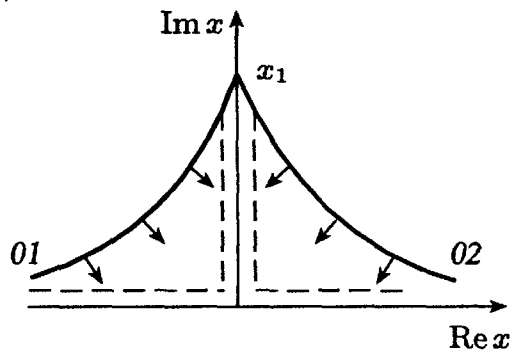


Рис. 24

а индексы R, L соответствуют потокам вправо (R) и влево (L). Направление определяется по правилу Хединга для ВКБ-решений ψ_0^\pm . Подставляя (7.35) в формулы перехода (7.33), получим

$$(A) \psi_R^- + e^{-i\pi/2 - k} \psi_L^+ \leftarrow \psi_R^+ (C). \quad (7.36)$$

Физическая интерпретация этой формулы очевидна. В области C существует только поток вправо (распространение частицы, прошедшей за барьер). В области A существуют потоки вправо и влево. ВКБ-выражение для коэффициента надбарьерного отражения, согласно определению, данному в п. 3.3, есть

$$R(E) = e^{-2k} = \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \text{Im} \int_{x_2}^{x_1} \sqrt{2m[E - U(x)]} dx \right\}. \quad (7.37)$$

7. Применимость квазиклассических выражений для коэффициентов прохождения и отражения можно оценить с помощью уравнения непрерывности. Для подбарьерного прохождения

$$j_A = 0, \quad j_C = D(E)$$

(мы предполагаем, что поток вправо в области A нормирован на единицу). Аналогично, для надбарьерного отражения

$$\lim j_A = 1 - R(E), \quad \lim j_C = 1.$$

Таким образом, область, в которой потенциал $U(x)$ заметным образом отличен от нуля, действует как источник частиц. Это физически

неудовлетворительно; поэтому выражениями (7.31) и (7.37) можно пользоваться только при условиях

$$D(E) \ll 1, \quad R(E) \ll 1.$$

Эту трудность можно обойти, потребовав, чтобы коэффициент при экспоненциально большой на линии Стокса функции (ψ^+ на линии $[-]$, ψ^- на линии $[+]$) менялся так, чтобы выполнялось уравнение непрерывности. Полагая (для подбарьерного прохождения)

$$a\psi_1^- + e^{-i\pi/2}\psi_1^+ \leftarrow e^{-K}\psi_2^+$$

и требуя сохранения тока в асимптотической области, получаем

$$a\psi_1 = \sqrt{1 + e^{-2K}},$$

откуда

$$D(E) = \frac{e^{-2K}}{1 + e^{-2K}}, \quad R(E) = \frac{1}{1 + e^{-2K}}. \quad (7.38)$$

Аналогично, для надбарьерного прохождения

$$D(E) = \frac{1}{1 + e^{-2k}}, \quad R(E) = \frac{e^{-2k}}{1 + e^{-2k}}. \quad (7.39)$$

Такое приближение, лежащее за пределами метода ВКБ, называется *приближением Кембла*. Коэффициенты $D(E)$ и $R(E)$ в приближении Кембла дают результат, близкий к точному, при любых E для полей с потенциалами $U_0 f(x/a)$ при

$$\xi^2 \ll 1.$$

Отметим, что при $E = U_0$ в этом приближении $D = R = 1/2$.

Представим выражение для коэффициента надбарьерного отражения (7.37) в виде

$$R(E) = \exp \left[-\frac{2}{\xi} \frac{\varkappa}{a\sqrt{2m}} \operatorname{Im} \int_{x_2}^{x_1} \sqrt{1 - \frac{f(x)}{\varkappa^2}} dx \right],$$

где

$$\varkappa^2 = \frac{2mE}{U_0}.$$

Для высоких энергий ($\varkappa^2 \gg 1$) интеграл в правой части может быть представлен как разложение по степеням \varkappa^{-1} :

$$R(E) = \exp \left[-\frac{\varkappa}{\xi} \left(a_1 + \frac{a_2}{\varkappa} + \dots \right) \right]. \quad (7.40)$$

Очевидно, наиболее существенную роль играет первый член (7.40):

$$R(E) \approx \exp \left(-a_1 \frac{\varkappa}{\xi} \right) = \exp \left(-a_1 \frac{2ma}{\hbar} \sqrt{E} \right).$$

Показатель экспоненты не содержит характерной глубины потенциала U_0 . Таким образом, в приближении ВКБ коэффициент отражения при заданной энергии остается конечным и при $U_0 \rightarrow 0$, что физически неудовлетворительно. Поэтому для рассмотрения надбарьерного отражения частиц высоких энергий точность принятых асимптотических решений оказывается недостаточной*.

8. Выше мы рассматривали ВКБ-решение для одномерного УШ (7.1). Результаты могут быть использованы и в тех случаях, когда УШ допускает разделение переменных в криволинейных координатах. Особенно большой интерес представляет случай центрального поля $U(r) = U_0 f(r/a)$, так как к этому случаю приводит задача двух тел. Уравнения для радиальной $R(r)$ и угловой $Y(\theta)$ частей ВФ имеют вид

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[E - U(r) + \frac{A}{r^2} \right] R = 0, \quad (7.41)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dY}{d\theta} \right) + \left(-A - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) Y = 0; \quad (7.42)$$

здесь A — константа разделения. Эти уравнения относятся к типу более общему, чем (7.1), а именно:

$$\frac{1}{\rho(x)} \frac{d}{dx} \rho(x) \frac{d\psi}{dx} + r(x, E)\psi = 0. \quad (7.43)$$

Такое уравнение можно привести к виду (7.1) бесконечным числом способов, определенных с точностью до произвольной непрерывной функции $y(x)$; замена

$$y = y(x), \quad \psi = \frac{\varphi(y)}{\sqrt{\rho(x)y'(x)}}$$

сводит уравнение (7.43) к квазиклассическому виду

$$\frac{d^2 \varphi}{dy^2} + [y'(x)]^2 [r(x) + s(x)] \varphi = 0,$$

где

$$s(x) = -\frac{1}{2} t(x) \frac{d}{dx} \ln \left[t(x) \sqrt{\frac{\rho(x)}{y'(x)}} \right],$$

$$t(x) = \frac{d}{dx} \ln [\rho(x)y'(x)].$$

Соответствующее квазиклассическое решение (в исходных переменных) имеет вид

$$\psi^\pm(x) = \frac{1}{\sqrt{\rho(x)}} [r(x) + s(x)]^{-1/4} \exp \left[\pm i \int_{x_k}^x \sqrt{r(x) + s(x)} dx \right]. \quad (7.44)$$

В качестве дополнительного условия потребуем, чтобы квазиклассическое решение (7.44) в особых точках уравнения (7.43) имело степенную асимптотику

$$\psi^\pm(x) = x^\nu(c_1 + c_2x + \dots)$$

с тем же показателем ν , что и точное решение. В случае, когда $\rho(x)$ имеет простой нуль, этому условию отвечает преобразование Пономарева

$$y = \int \frac{dx}{\rho(x)}, \quad \varphi[y(x)] = \psi(x), \quad (7.45)$$

приводящее к равенству

$$s(x) = 0.$$

Для уравнения (7.41) эта процедура нуждается в изменении, так как $\rho(x)$ имеет нуль второго порядка. Начнем с уравнения (7.42):

$$y(\theta) = \ln \operatorname{tg}(\theta/2).$$

ВКБ-решение в классически доступной области есть

$$Y(\theta) = \frac{1}{\sqrt{\sin \theta p(\theta)}} \cos \left[\int_{\theta_1}^{\theta} p(\theta) d\theta - \frac{\pi}{4} \right],$$

где

$$p(\theta) = \sqrt{-A - \frac{m^2}{\sin^2 \theta}}.$$

Константу разделения A определим из условия квантования

$$\int_{\theta_1}^{\theta_2} \frac{\sqrt{-A(1-x^2) - m^2}}{1-x^2} dx = \pi \left(n_\theta + \frac{1}{2} \right),$$

где $x = \cos \theta$. Вычисляя интеграл, получаем

$$A = -(n_\theta + |m| + 1/2)^2 = -(l + 1/2)^2 = -\lambda^2,$$

что отличается от точного значения константы разделения

$$A_0 = -l(l + 1).$$

ВКБ-решение для угловой ВФ имеет вид

$$Y_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sin \theta}} \left(\lambda^2 - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right)^{-1/4} \times \\ \times \cos \left(\int_{\theta_1}^{\theta} \sqrt{\lambda^2 - \frac{m^2}{\sin^2 \theta}} d\theta - \frac{\pi}{4} \right).$$

При $\lambda^2 \gg m^2 \sin^{-2} \theta$ это выражение переходит в

$$Y_{lm}(\theta) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{\sin \theta}} \cos \left(\lambda \theta - \frac{m\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \right).$$

Подставляя полученное значение константы разделения A в уравнение (7.41) и используя преобразование (7.45), которое в настоящем случае имеет вид

$$y(r) = r^{-1},$$

найдем квазиклассическое решение радиального уравнения.

Собственные значения энергии определяются из условия квантования для радиальной компоненты

$$\int \sqrt{\eta - f(x) - \frac{\lambda^2}{x^2}} dx = \pi \xi \left(n_r + \frac{1}{2} \right).$$

Отметим, что для любых несингулярных потенциалов квазиклассическое радиальное УШ имеет по крайней мере одну действительную точку поворота при любых энергиях, так как даже в s -случае центробежный потенциал отличен от нуля.

ЗАДАЧИ

1. Показать, что ВКБ-решение применимо тем ближе к действительной точке поворота, чем больше в ней $U'(x)$.

2. Найти ВКБ-спектр гармонического осциллятора.

3. Найти ВКБ-спектр частицы в потенциале Морза

$$U(x) = U_0(e^{x/a} - 1)^2.$$

4. Найти ВКБ-спектр частицы в потенциале

$$U(x) = -U_0 \operatorname{ch}^{-2}(x/a).$$

5. Найти ВКБ-спектр частицы в потенциале

$$U(x) = U_0 \operatorname{tg}^2(\pi x/a), \quad |x| < a/2.$$

6. Найти ВКБ-спектр частицы в потенциале

$$U(x) = U_0 \left(\frac{a}{x} - \frac{x}{a} \right)^2, \quad x > 0.$$

7. Найти ВКБ-коэффициенты $D(E)$, $R(E)$ в поле с потенциалом

$$U(x) = -\frac{m\omega^2}{2} x^2.$$

Использовать приближение Кембла. Сравнить с точным решением.

8. Разложив потенциал

$$U(x) = U_0 \operatorname{ch}^{-2}(x/a)$$

до членов $\sim x^2$, найти ВКБ-коэффициенты $D(E)$, $R(E)$ при $E \approx U_0$, используя результат задачи 7.7. Сравнить с разложением точного решения при $\xi^2 \ll 1$.

9. Найти ВКБ-коэффициент $R(E)$ для частицы в поле

$$U(x) = U_0 \frac{a^2}{a^2 + x^2}.$$

Рассмотреть случаи $U_0 > 0$, $U_0 < 0$.

По принципу построения формул связи ВКБ-приближение пригодно для решения УШ только с аналитическими потенциалами. Однако в ряде случаев для оценки коэффициента подбарьерного прохождения $D(E)$ можно использовать и разрывный потенциал, так как интеграл в показателе экспоненты (7.31) нечувствителен к наличию разрывов. Для рассмотрения надбарьерного отражения использование разрывных потенциалов недопустимо.

10. Оценить ВКБ-коэффициент прохождения $D(E)$ в поле с потенциалом (рис. 25)

$$\begin{aligned} U(x) &\approx -U_0 & (x < 0), \\ U(x) &\approx -Fx & (x > 0). \end{aligned}$$

Такой потенциал представляет интерес для описания холодной эмиссии электронов из металла в электрическом поле напряженности F . Величина U_0 соответствует работе выхода.

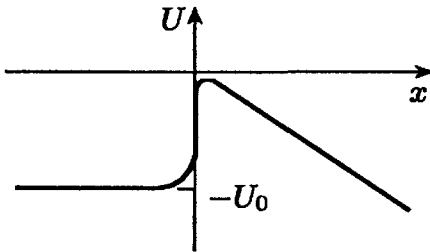


Рис. 25

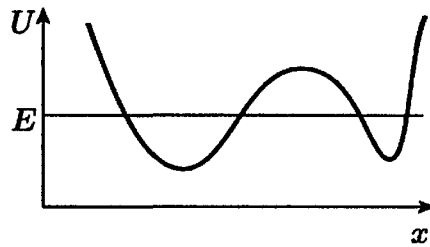


Рис. 26

11. Показать, что для радиального УШ в сферических координатах использование точной константы разделения $A_0 = l(l + 1)$ и преобразования Лангера

$$y(r) = \ln r$$

приводят к тому же ВКБ-решению, что и преобразование Пономарева (7.45).

12. Найти ВКБ-спектр частицы в кулоновском поле.

13. Найти ВКБ-спектр сферического осциллятора

$$U(r) = \frac{m\omega^2 r^2}{2}.$$

14. Показать, что в квазиклассическом приближении условие существования связанного состояния в поле

$$U(r) = -\frac{\gamma}{r^2}$$

совпадает с точным.

15. Найти условие ВКБ-квантования для уровней энергии в потенциале, имеющем вид двойной ямы (рис. 26).

ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ ПОЛЕ

0. Многие физические свойства веществ определяются в конечном счете кулоновским взаимодействием электронов и ядер. Поэтому задачи о спектрах систем заряженных частиц представляют большой интерес. Простейшая задача о спектре частицы в кулоновском поле была рассмотрена в гл. 5. В этой главе мы рассмотрим более сложные случаи, используя приближенные методы.

1. Рассмотрим расщепление уровней атома водорода в однородном электрическом поле (*эффект Штарка*). Пусть напряженность поля такова, что энергия расщепления мала по сравнению с разностями уровней невозмущенного спектра, но велика по сравнению с энергией спин-орбитального взаимодействия (см. гл. 10). Потенциальная энергия в атомной системе единиц имеет вид

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{1}{r} + Fz. \quad (8.1)$$

Так как функция $U(\mathbf{r})$ инвариантна относительно вращения вокруг оси z , то проекция l_z является интегралом движения (см. п. 3.8). Далее, при отражении в плоскости, проходящей через ось z , проекция l_z изменяет знак, а функция $U(\mathbf{r})$ остается неизменной. Следовательно, стационарные состояния, отличающиеся только знаком проекции момента, имеют одну и ту же энергию.

Невозмущенные стационарные состояния атома водорода вырождены с кратностью n^2 . Если в качестве базиса при вычислениях по теории возмущений выбрать общие СФ операторов \hat{H}_0 , \hat{l}^2 и \hat{l}_z , то при заданном значении m для отыскания первой поправки к энергии надо решить секулярное уравнение степени $(n - |m|)$.

Задачу можно упростить, если в качестве базиса взять другие функции, симметрия которых соответствует симметрии $U(\mathbf{r})$. Характер потенциального поля таков, что начало координат является выделенной точкой, а направление электрического поля — выделенным направлением. Такой симметрией обладает параболическая система координат, если фокус семейства параболоидов вращения поместить в начало координат, а ось вращения направить вдоль оси z . В этом случае

$$x = \sqrt{\xi\eta} \cos \varphi, \quad y = \sqrt{\xi\eta} \sin \varphi, \quad z = \frac{1}{2} (\xi - \eta). \quad (8.2)$$

Такая система координат ортогональна. Квадрат длины дуги

определяется выражением

$$ds^2 = \frac{\xi + \eta}{4\xi} d\xi^2 + \frac{\xi + \eta}{4\eta} d\eta^2 + \xi\eta d\varphi^2,$$

а элемент объема

$$dV = \frac{\xi + \eta}{4} d\xi d\eta d\varphi.$$

Уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{1}{2} \left[\frac{4}{\xi + \eta} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial \psi}{\partial \xi} \right) + \frac{4}{\xi + \eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial \psi}{\partial \eta} \right) + \frac{1}{\xi\eta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{2}{\xi + \eta} \psi + \frac{F}{2} (\xi - \eta) \psi = E\psi. \quad (8.3)$$

Разделим переменные, полагая

$$\psi = u_1(\xi) u_2(\eta) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (8.4)$$

Тогда уравнения для функций u_1 и u_2 примут вид

$$\xi \frac{d^2 u_1}{d\xi^2} + \frac{du_1}{d\xi} + \left(-\frac{m^2}{4\xi} - \frac{|E|\xi}{2} - \frac{F}{2} \xi^2 + \lambda_1 \right) u_1 = 0, \quad (8.5)$$

$$\eta \frac{d^2 u_2}{d\eta^2} + \frac{du_2}{d\eta} + \left(-\frac{m^2}{4\eta} - \frac{|E|\eta}{2} + \frac{F}{2} \eta^2 + \lambda_2 \right) u_2 = 0. \quad (8.6)$$

Константы разделения λ_1 и λ_2 удовлетворяют условию

$$\lambda_1 + \lambda_2 = 1. \quad (8.7)$$

Мы будем искать поправки к энергии в первом приближении. Положим в уравнениях (8.5), (8.6) $F = 0$ и найдем невозмущенные ВФ в параболических координатах.

Число поверхностей, на которых ВФ обращается в нуль *, зависит от значения E ($E = -1/2n^2$), а не от вида системы координат. Если обозначить через n_1 и n_2 число нулей функций u_1 и u_2 , то

$$n_1 + n_2 + |m| + 1 = n. \quad (8.8)$$

Числа n_1 и n_2 называются *параболическими квантовыми числами*. Так как оператор

$$\hat{L} = x \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d}{dx} \quad (8.9)$$

эрмитов на полупрямой $(0, \infty)$, то решения уравнений (8.5) и (8.6), соответствующие различным значениям n_1 и n_2 , ортогональны. При $n_1 \neq n_1'$

$$\int u_1(\xi; n_1', E, m) u_1(\xi; n_1, E, m) d\xi = 0. \quad (8.10)$$

Из ортогональности функций u_1, u_2 и из условия

$$n'_1 + n'_2 = n_1 + n_2$$

следует, что недиагональные матричные элементы оператора возмущения равны нулю:

$$\begin{aligned} \langle n'_1, n'_2, m | Fz | n_1, n_2, m \rangle &= \\ &= \iint u_{n'_1}(\xi) u_{n_1}(\xi) (\xi^2 - \eta^2) u_{n'_2}(\eta) u_{n_2}(\eta) F \frac{d\xi d\eta}{8} = 0. \end{aligned} \quad (8.11)$$

Следовательно, при нахождении поправки $E^{(1)}$ отпадает необходимость решать секулярное уравнение: найденные ВФ в параболических координатах являются правильными в смысле п. 6.4.

Найдем поправки к значениям энергии уровней атома водорода:

$$E^{(1)} = \frac{F}{2} \frac{\int u_{n_1}^2(\xi) u_{n_2}^2(\eta) (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta}{\int u_{n_1}^2(\xi) u_{n_2}^2(\eta) (\xi + \eta) d\xi d\eta}. \quad (8.12)$$

Подстановками

$$u_1(\xi) = R_1(\rho_1) \sqrt{\rho_1}, \quad u_2(\eta) = R_2(\rho_2) \sqrt{\rho_2}, \quad (8.13)$$

где

$$\rho_1 = \frac{\xi}{n}, \quad \rho_2 = \frac{\eta}{n}, \quad (8.14)$$

уравнения (8.5), (8.6) можно привести к виду (5.15):

$$R_i'' + \frac{2}{\rho_i} R_i' + \left(\frac{\lambda_i n}{\rho_i} - \frac{1}{4} - \frac{m^2 - 1}{4\rho_i^2} \right) R_i = 0. \quad (8.15)$$

Полагая функции R_i нормированными условием

$$\int R_i^2 \rho_i^2 d\rho_i = 1,$$

мы представим выражение для поправки к уровням в виде

$$E^{(1)} = \frac{F}{2} n \frac{\overline{\rho_1 \rho_2^{-1}} - \overline{\rho_1^{-1} \rho_2}}{\overline{\rho_1^{-1}} + \overline{\rho_2^{-1}}}. \quad (8.16)$$

Из полученных в гл. 5 результатов (см. (5.5) и задачи 5.3 и 5.5) следует:

$$\lambda_1 n = n_1 + \frac{|m| + 1}{2}, \quad \lambda_2 n = n_2 + \frac{|m| + 1}{2}, \quad (8.17)$$

$$\overline{\rho_i} = \frac{1}{\lambda_i n} \left[3\lambda_i^2 n^2 - \frac{m^2 - 1}{4} \right], \quad (8.18)$$

$$\overline{\rho_i^{-1}} = \frac{1}{2\lambda_i n}. \quad (8.19)$$

Подставляя эти формулы в выражение (8.16), получаем

$$E^{(1)} = \frac{3}{2}Fn(n_1 - n_2). \quad (8.20)$$

Итак, в первом порядке теории возмущений (в линейном по полю приближении) уровень энергии с главным квантовым числом n расщепляется на $2n - 1$ компонент. Расстояние между крайними компонентами $\Delta E = 3Fn(n - 1)$.

Поскольку кратность вырождения невозмущенного уровня равна n^2 , то линейный эффект Штарка снимает вырождение не полностью. ВФ, определяемые параболическими квантовыми числами n_1, n_2, m , несимметричны по отношению к плоскости $z = 0$. При $n_1 > n_2$ большая часть плотности вероятности электрона расположена в области положительных значений z . В стационарном состоянии с квантовыми числами n_1, n_2, m средний дипольный момент атома водорода равен

$$\bar{d}_z = -\frac{3}{2}n(n_1 - n_2).$$

2. При $n_1 = n_2$ линейный эффект Штарка отсутствует. Вычислим поправку к энергии во втором приближении (квадратичный по полю эффект Штарка), ограничившись случаем основного состояния ($n = 1$). Из теории возмущений Рэлея–Шредингера следует, что поправка первого порядка к ВФ $\psi_1^{(1)}$ должна удовлетворять уравнению

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{r} + \frac{1}{2 \cdot 1^2}\right)\psi^{(1)} = -Fz\frac{e^{-r}}{\sqrt{\pi}}. \quad (8.21)$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$\psi^{(1)} = Fz\left(\frac{r}{2} + 1\right)\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r}. \quad (8.22)$$

Поправка к энергии второго порядка выражается через поправку к ВФ первого порядка соотношением

$$E^{(2)} = \int \psi^{(1)}Fz\psi^{(0)} dr. \quad (8.23)$$

Вычисление интеграла приводит к результату

$$E^{(2)} = -\frac{9}{4}F^2. \quad (8.24)$$

Как всегда, поправка второго порядка к энергии основного состояния отрицательна. Приведем без вывода общее выражение для поправки второго порядка*:

$$E^{(2)} = -\frac{F^2}{16}n^4 \left[17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19\right]. \quad (8.25)$$

Отметим, что поправка второго порядка оказывается отрицательной для состояний с любыми значениями n_1, n_2, m .

Линейный по полю эффект Штарка связан с существованием стационарных состояний с отличным от нуля значением среднего дипольного момента. Такие состояния можно получить только при наличии случайного вырождения и только в кулоновском поле. В общем случае в отсутствие случайного вырождения уровней энергии по l ВФ системы обладают определенной четностью и средние значения дипольного момента в стационарных состояниях равны нулю. Поэтому в общем случае сдвиг уровней энергии в электрическом поле определяется поправками второго порядка

$$E^{(2)} = -\frac{1}{2}\alpha_{ik}^{(n)} F_i F_k. \quad (8.26)$$

Тензор $\alpha_{ik}^{(n)}$ есть *поляризуемость атома* во внешнем электростатическом поле. Представив гамильтониан в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \mathbf{F}\mathbf{d},$$

где \mathbf{d} — дипольный момент атома, и используя равенство (3.13)

$$\left\langle n \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right| n \right\rangle = \frac{\partial E_n}{\partial \lambda},$$

для средней компоненты дипольного момента атома получим

$$\bar{d}_i^{(n)} = \alpha_{ik}^{(n)} F_k.$$

Из (8.24) следует, что поляризуемость атома водорода в основном состоянии $\alpha_{ii} = 9/2$ (в атомных единицах).

3. Рассмотрим задачу о движении электронов в поле двух кулоновских центров 1 и 2, находящихся на расстоянии R друг от друга (рис. 27). Такая модель используется, например, для описания молекулярного иона водорода H_2^+ . Применительно к этому случаю рассмотрим вычисление энергии основного состояния электрона в поле одинаковых центров с зарядами $Z_1 = Z_2 = 1$.

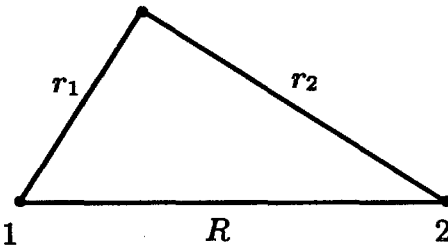


Рис. 27

Используем метод линейных комбинаций, изложенный в п. 6.13. Вблизи каждого из ядер поле близко к чисто кулоновскому; положим

$$\theta(r) = a_1 \varphi_0(r_1) + a_2 \varphi_0(r_2),$$

где $\varphi_0(r_1)$ — нормированная ВФ основного состояния атома

водорода в атомных единицах

$$\varphi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}.$$

Гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m} \Delta - \frac{e^2}{r_1} - \frac{e^2}{r_2} + \frac{e^2}{R},$$

где R — расстояние между ядрами, r_1 и r_2 — расстояние электрона от первого и второго ядер. Так как

$$\begin{aligned} S_{11} &= S_{22} = 1, \\ H_{11} &= H_{22} = H, \end{aligned}$$

то решение уравнения (6.55) имеет вид

$$E_{\pm} = \frac{H \pm H_{12}}{1 \pm S_{12}}. \quad (8.27)$$

Подстановка полученных значений в (6.55) дает

$$a_1 = \pm a_2.$$

Поэтому экстремальная нормированная пробная функция есть

$$\theta^{\pm}(r) = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm S_{12})}} (\varphi_1 \pm \varphi_2). \quad (8.28)$$

Матричные элементы имеют вид

$$\begin{aligned} H_{11} &= \frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{2a_0} - e^2 \int \frac{1}{r_2} \varphi_0^2(r_1) dr, \\ H_{12} &= S_{12} \left(\frac{e^2}{R} - \frac{e^2}{2a_0} \right) - e^2 \int \frac{1}{r_2} \varphi_0(r_1) \varphi_0(r_2) dr. \end{aligned}$$

Для вычисления интегралов удобно использовать конфокальные эллиптические координаты, определяемые соотношением

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R}, \quad \eta = \frac{r_1 - r_2}{R}, \quad \varphi = \varphi, \quad (8.29)$$

где φ — азимутальный угол. Элемент объема в этих координатах есть

$$dV = \frac{R^3}{8} (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta d\varphi.$$

Тогда

$$\begin{aligned} S_{12} &= \left(1 + y + \frac{1}{3} y^2 \right) e^{-y}, \\ H &= -\varepsilon \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{y} (1 + y) e^{-2y} \right], \quad \varepsilon = \frac{e^2}{a_0}, \\ H_{12} &= -\varepsilon \left[\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{y} \right) S_{12} + (1 + y) e^{-y} \right], \end{aligned} \quad (8.30)$$

где $y = Ra_0^{-1}$. Зависимость E_+ и E_- от расстояния между ядрами показана на рис. 28. Минимальное значение E соответствует симметричной функции

$$\theta^\pm = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} [\varphi_0(r_1) + \varphi_0(r_2)].$$

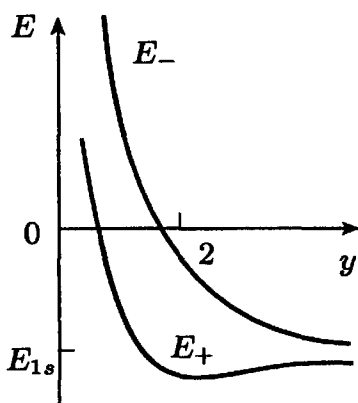
При $y_0 = 2$ $E_0^+ = -0,554$, $E_0^- = -0,161$ (в атомных единицах). Значение E_0^+ меньше, чем сумма энергий основного состояния атома водорода E_{1s} и удаленного на бесконечность протона: возникает

устойчивое состояние иона H_2^+ . В этом состоянии, описываемом четной относительно перестановки ядер функцией θ^+ , вероятность нахождения электрона между ядрами больше, чем в антисимметричном состоянии.

Точное значение $E_0^+ = -0,6026$ находится в удовлетворительном согласии с результатом наших вычислений. Следует учесть, что в проделанном расчете предполагалась малость величины

$$\frac{1}{y} = \frac{a_0}{R} \ll 1, \quad (8.31)$$

Рис. 28



так как только при этом условии ВФ основного состояния атома водорода можно использовать как ВФ нулевого приближения. В наиболее интересной области — в окрестности минимума E^+ — значение $y^{-1} \approx 0,5$ с трудом удовлетворяет требованию (8.31).

Энергия иона H_2^+ есть функция расстояния между ядрами $E_n(R)$. В нашем расчете ядра предполагались фиксированными. В следующем приближении функции $E_n(R)$ — электронные термы — можно рассматривать как эффективный потенциал взаимодействия между ядрами и решать задачу о движении ядер в таком потенциале.

4. Выражение (8.27) представляет собой полученную вариационным методом оценку сверху для электронных термов. Эта оценка не дает правильной асимптотической зависимости $E_n(R)$ при $R \rightarrow \infty$. В самом деле, при больших R ВФ электрона можно считать локализованной в окрестности одного из ядер (припишем ему заряд Z_1) и описывать ее квантовыми числами n_1, n_2, m (или n_r, l, m), а поле, создаваемое вторым ядром (с зарядом Z_2), считать однородным:

$$F = Z_2 e R^{-2} \quad (8.32)$$

и рассматривать как возмущение. Тогда для возбужденных состояний с отличным от нуля дипольным моментом будет отлична от нуля

поправка к энергии первого порядка:

$$E_n^{(1)}(R) = \bar{d} \cdot Z_2 e R^{-2},$$

и во всяком случае будет отлична от нуля поправка второго порядка:

$$E_n^{(2)}(R) = \frac{\alpha}{2} (Z_2 e R^{-2})^2. \quad (8.33)$$

Эти поправки с ростом R убывают степенным образом, а не экспоненциальным, как S и H_{12} в п. 8.3. Электронные термы, соответствующие ВФ, локализованным вблизи ядра Z_1 , называются Z_1 -термами задачи двух кулоновских центров.

Отметим, что использование теории возмущений для вычисления сдвига уровней атома водорода однородным электрическим полем нуждается в той же оговорке, что и вычисления по теории возмущений уровней энергии ангармонического осциллятора. Потенциал возмущенного поля неограниченно убывает при больших z , и система обладает только непрерывным энергетическим спектром. Однако вычисленные поправки имеют смысл как члены, пропорциональные $Z_2 R^{-2}$ и $Z_2^2 R^{-4}$ соответственно в разложении Z_1 -термов задачи двух кулоновских центров при $R \rightarrow \infty$.

5. Электростатическое взаимодействие может играть существенную роль и при взаимодействии между электронейтральными атомами. Энергия электростатического взаимодействия между двумя атомами с зарядами ядер Z_1 и Z_2 имеет вид

$$\hat{V} = \frac{Z_1 Z_2}{R} - \sum_{\alpha=1}^{Z_1} \frac{Z_2}{r_{b\alpha}} - \sum_{\beta=1}^{Z_2} \frac{Z_1}{r_{a\beta}} + \sum_{\alpha=1}^{Z_1} \sum_{\beta=1}^{Z_2} \frac{1}{r_{\alpha\beta}}.$$

Электроны атомов a и b нумеруются индексами α и β соответственно. Обозначения переменных показаны на рис. 29. При расстояниях R , больших по сравнению с атомными:

$$R \gg |r_\alpha|, \quad |r_\beta|,$$

имеет смысл разложить оператор \hat{V} по степеням r/R . Учитывая соотношения

$$\frac{1}{r_{\alpha b}} = \frac{1}{R} + \frac{(\mathbf{r}_\alpha \mathbf{n})}{R^2} + \frac{3(\mathbf{r}_\alpha \mathbf{n})^2 - r_\alpha^2}{2R^3} + \dots,$$

$$\frac{1}{r_{\beta a}} = \frac{1}{R} - \frac{(\mathbf{r}_\beta \mathbf{n})}{R^2} + \frac{3(\mathbf{r}_\beta \mathbf{n})^2 - r_\beta^2}{2R^3} + \dots,$$

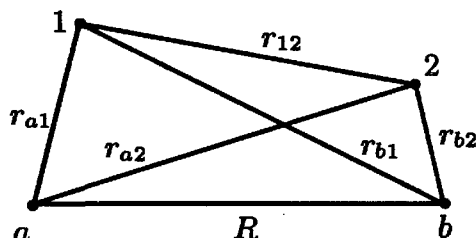


Рис. 29

$$\frac{1}{r_{\alpha\beta}} = \frac{1}{|R\mathbf{n} + \mathbf{r}_\beta - \mathbf{r}_\alpha|} = \frac{1}{R} + \frac{(\mathbf{r}_\beta - \mathbf{r}_\alpha, \mathbf{n})}{R^2} + \frac{3(\mathbf{r}_\beta - \mathbf{r}_\alpha, \mathbf{n})^2 - (\mathbf{r}_\beta - \mathbf{r}_\alpha)^2}{2R^3} + \dots,$$

для энергии взаимодействия нейтральных атомов получаем

$$\hat{V} = -\frac{1}{R^3} \sum_{\alpha=1}^{Z_1} \sum_{\beta=1}^{Z_2} \{3(\mathbf{r}_\alpha \mathbf{n})(\mathbf{r}_\beta \mathbf{n}) - \mathbf{r}_\alpha \mathbf{r}_\beta\} + \dots \quad (8.34)$$

В разложении \hat{V} по степеням r/R первый член, пропорциональный R^{-3} , соответствует диполь-дипольному взаимодействию, второй ($\sim R^{-4}$) — диполь-квадрольному взаимодействию и т. д.

Поправка к энергии первого порядка по диполь-дипольному взаимодействию может быть отлична от нуля, если атомы (водорода) находятся в возбужденных состояниях с отличными от нуля значениями дипольного момента. Поправка, пропорциональная R^{-3} , может быть отлична от нуля и при вычислении взаимодействия между произвольными одинаковыми атомами, находящимися в различных состояниях ψ_m и ψ_n , и в том случае, когда средние значения дипольного момента в этих состояниях равны нулю (т. е. в отсутствие случайного вырождения). В случае двух атомов состояния системы $\psi_m(1)\psi_n(2)$ и $\psi_n(1)\psi_m(2)$ обладают одинаковой энергией. Поэтому при вычислении поправок к энергии системы под действием возмущения (8.34) следует использовать теорию возмущений для вырожденных уровней. Входящие в секулярное уравнение матричные элементы \hat{V}_{12} могут быть отличны от нуля; поправки к энергии будут равны

$$E_{1,2}^{(1)} = \pm \langle m, n | \hat{V} | n, m \rangle. \quad (8.35)$$

Отметим, что при вычислении (8.35) атомы предполагаются ориентированными. Для системы без выделенных направлений среднее по ориентациям значение поправки (8.35) есть нуль. Отличный от нуля вклад члены резонансного диполь-дипольного взаимодействия дают при наличии выделенных направлений (например, полем в кристаллической решетке).

6. Если в атоме распределение заряда обладает сферической симметрией, то все электрические мультипольные моменты обращаются в нуль. Поэтому в первом порядке теории возмущений в нуль обращаются средние значения всех членов в операторе $\hat{V}(R)$. Во втором приближении энергия взаимодействия имеет вид

$$\hat{V}^{(2)}(R) = - \sum_{m,n} \frac{|\langle m, n | \hat{V} | 0, 0 \rangle|^2}{E_{am} + E_{bn} - E_{a0} - E_{b0}}. \quad (8.36)$$

Если атомы находятся в основных состояниях, то

$$E_{am} > E_{a0}, \quad E_{bm} > E_{b0},$$

и взаимодействие (8.36) соответствует притяжению силами Ван-дер-Ваальса

$$\widehat{V}_2(R) \sim R^{-6}. \quad (8.37)$$

Рассмотрим более подробно взаимодействие двух атомов водорода. Ограничимся диполь-дипольным взаимодействием

$$u = -\frac{1}{R^3} (2z_1z_2 - x_1x_2 - y_1y_2). \quad (8.38)$$

В первом приближении теории возмущений ВФ системы двух атомов имеет вид

$$\psi = \psi_0 + \sum' \frac{\langle n|u|0 \rangle}{E_0 - E_n} \psi_n,$$

где ВФ невозмущенного состояния ψ_0 в атомных единицах имеет вид

$$\psi_0 = \frac{1}{\pi} e^{-(r_a+r_b)}.$$

Полагая $\widehat{V}_2(R) = CR^{-6}$, оценим константу C вариационным методом. Учитывая, что

$$\sum_n' \langle n|u|0 \rangle \psi_n = -\psi_0 \langle 0|u|0 \rangle + \sum_n \langle n|u|0 \rangle \psi_n = u\psi_0,$$

в качестве пробной функции в вариационном методе используем однопараметрическую функцию

$$\psi = \frac{\psi_0(1+\lambda u)}{\iint \psi_0^2(1+\lambda u)^2 dr_1 dr_2}. \quad (8.39)$$

Для среднего значения энергии получим выражение

$$\bar{E} = -1 + \frac{u(1+\lambda u)^2}{(1+\lambda u)^2} + \frac{\lambda^2 (\nabla_1 u)^2 + (\nabla_2 u)^2}{2(1+\lambda u)^2}. \quad (8.40)$$

Так как

$$\begin{aligned} \bar{x}_i &= \bar{y}_i = \bar{z}_i = 0, \\ \bar{x}_i^2 &= \bar{y}_i^2 = \bar{z}_i^2 = 1, \end{aligned}$$

то

$$\begin{aligned} \bar{u} &= 0, \quad \bar{u^3} = 0, \quad \bar{u^2} = 6R^{-6}, \\ \overline{(\nabla_1 u)^2 + (\nabla_2 u)^2} &= 12/R^6. \end{aligned} \quad (8.41)$$

Используя соотношения (8.40) и (8.41) и пренебрегая членами, убывающими быстрее, чем R^{-6} , получим

$$\bar{E} = -1 + \frac{12}{R^6} \left(\lambda + \frac{\lambda^2}{2} \right). \quad (8.42)$$

Из условия стационарности \bar{E} получаем $\lambda = -1$. Поскольку для оценки $E^{(2)}(R)$ мы пользовались вариационным методом, то результат (8.42) представляет собой оценку сверху

$$V^{(2)}(R) < -\frac{6}{R^6}. \quad (8.43)$$

Для получения оценки снизу в формуле (8.36) заменим все E_{am} и E_{bn} на значение энергии первого возбужденного состояния

$$E_{a2} = E_{b2} = -\frac{1}{2 \cdot 2^2} = -\frac{1}{8}.$$

Тогда

$$V^{(2)}(R) > -\frac{4}{3} \sum' |\langle m n | u | 0 0 \rangle|^2.$$

Так как

$$\sum' |\langle m n | u | 0 0 \rangle|^2 = \langle 0 0 | u^2 | 0 0 \rangle - |\langle 0 0 | u | 0 0 \rangle|^2,$$

то

$$V^{(2)}(R) > -\frac{4}{3} \frac{6}{R^6}.$$

Таким образом, для потенциала сил Ван-дер-Ваальса, действующих между двумя атомами водорода, получаем оценку

$$-\frac{8}{R^6} < V^{(2)}(R) < -\frac{6}{R^6}. \quad (8.44)$$

Более точные вычисления приводят к значению константы $C = -6,5$.

7. Поясним то обстоятельство, что нейтральные атомы притягиваются в результате электростатического взаимодействия, хотя все электрические мультипольные моменты равны нулю. Для ВФ в первом приближении мы получаем выражение

$$\psi = \psi_0(r_{1a}) \psi_0(r_{2b}) \left[1 + \frac{2}{R^3} (2z_1 z_2 - x_1 x_2 - y_1 y_2) \right]. \quad (8.45)$$

Если пренебречь членами, пропорциональными R^{-6} , то плотность вероятности для электронов будет иметь вид

$$W(r_{1a}, r_{2b}) = w(r_{1a}) w(r_{2b}) \left[1 + \frac{2}{R^3} (2z_1 z_2 - x_1 x_2 - y_1 y_2) \right]. \quad (8.46)$$

Таким образом, и при учете диполь-дипольного взаимодействия распределение зарядов в каждом атоме остается сферически-симметричным:

$$\int W(r_{1a}, r_{2b}) dr_{2b} = w(r_{1a}).$$

Однако ВФ (8.45) нельзя представить в виде

$$\psi = \varphi(r_{1a}) \varphi(r_{2b}).$$

Между положениями электронов в атомах с ВФ (8.45) существует корреляция, причем более вероятны состояния с меньшей энергией. Таким образом, существование сил Ван-дер-Ваальса в нулевом приближении можно объяснить не деформацией электронных оболочек, а корреляцией между положением электронов.

Докажем аддитивность сил Ван-дер-Ваальса на примере системы, состоящей из трех атомов. Запишем энергию взаимодействия в виде

$$\hat{V} = V(1, 2) + V(2, 3) + V(3, 1),$$

где через 1, 2 и 3 обозначена совокупность координат первого, второго и третьего атомов. ВФ системы в нулевом приближении представим в виде

$$\psi = \psi_{ai}(1) + \psi_{bk}(2) + \psi_{cl}(3),$$

где индексы i, j, l указывают квантовые состояния атомов a, b, c . Функции $\psi_{ai}(1)$, принадлежащие различным состояниям i , ортогональны.

Во втором порядке теории возмущений энергия взаимодействия имеет вид

$$E = \langle 0 0 0 | \hat{V} | 0 0 0 \rangle + \sum' \frac{|\langle i k l | \hat{V} | 0 0 0 \rangle|^2}{E_{a0} + E_{b0} + E_{c0} - E_{ai} - E_{bk} - E_{cl}}. \quad (8.47)$$

Индекс 0 соответствует основному состоянию. Первый член в (8.47) описывает энергию классического взаимодействия мультиполей и в нашем случае равен нулю. Во втором члене все слагаемые, в которых одновременно $i, k, l \neq 0$, исчезают вследствие ортогональности исходных ВФ:

$$\langle i k l | V(1, 2) | 0 0 0 \rangle = \langle i k | V(1, 2) | 0 0 \rangle \langle l | 0 \rangle = 0. \quad (8.48)$$

Частные суммы, в которые входят слагаемые с одним отличным от нуля индексом, учитывают поляризационные взаимодействия в результирующем поле двух остальных атомов. В случае, когда распределение зарядов в атомах обладает шаровой симметрией, эти суммы не могут быть получены путем аддитивного учета энергии взаимодействия каждой пары атомов.

Таким образом, в выражении (8.47) сохраняются только члены, в которых два индекса k, l отличны от нуля. При сделанных предположениях относительно распределения заряда в атомах энергия взаимодействия может быть разложена на три частные суммы:

$$E = \sum'_{ik \neq 0} \frac{|\langle i k 0 | \hat{V} | 0 0 0 \rangle|^2}{E_{a0} + E_{b0} - E_{ai} - E_{bk}} + \sum'_{kl \neq 0} \frac{|\langle 0 k l | \hat{V} | 0 0 0 \rangle|^2}{E_{b0} + E_{c0} - E_{bk} - E_{cl}} + \sum'_{il \neq 0} \frac{|\langle i 0 l | \hat{V} | 0 0 0 \rangle|^2}{E_{a0} + E_{c0} - E_{ai} - E_{cl}}. \quad (8.49)$$

Так как

$$\langle i k 0 | \hat{V} | 0 0 0 \rangle = \langle i k | V(1, 2) | 0 0 \rangle,$$

то выражение (8.40) состоит из трех слагаемых, каждое из которых описывает взаимодействие пары атомов силами Ван-дер-Ваальса. Легко видеть, что этот расчет может быть распространен на произвольное число атомов.

ЗАДАЧИ

1. Показать, что в состоянии атома водорода с параболическими квантовыми числами n_1, n_2 проекция вектора Рунге–Ленца (5.21) на ось z есть

$$A_z = \frac{n_2 - n_1}{n}.$$

2. Доказать, что в классическом случае при движении в поле

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{\alpha}{r} - \mathbf{F}\mathbf{r}$$

сохраняется величина

$$B = \mathbf{A}\mathbf{F} + \frac{1}{2} [\mathbf{F}\mathbf{r}]^2,$$

где \mathbf{A} — вектор Рунге–Ленца (5.21). Показать, что соответствующий квантовомеханический оператор коммутирует с гамильтонианом.

3. Определить наибольшее значение квантового числа n , при котором движение электрона в поле (8.1) остается квазифинитным (имеет три действительные точки поворота).

4. Выразить квадрупольный момент заряженной частицы в центральном поле через средний квадрат ее расстояния от центра.

5. Оценить величину квадрупольного расщепления уровней атома водорода в поле удаленного ядра Z_2 на расстоянии R .

6. Рассмотреть методом линейных комбинаций возможность существования иона He_2^{+++} .

7. Оценить вариационным методом поляризуемость системы двух частиц, взаимодействие которых описывается потенциалом

$$U(r) = -q\delta(r - a),$$

в s -состоянии. Частицы считать заряженными, но кулоновским взаимодействием пренебречь.

8. В случае $qma \gg \hbar^{-2}$ систему, описанную в предыдущей задаче, можно считать по свойствам близкой к жесткому ротатору классической механики. Напомним, что непосредственное наложение связей в квантовой механике невозможно. Найти уровни энергии такой системы.

9. Найти поправку второго порядка к уровням энергии «жесткого ротатора» с дипольным моментом d в однородном электрическом поле.

РАССЕЯНИЕ

0. В гл. 5 мы рассматривали стационарные состояния дискретного спектра для задачи двух тел, взаимодействие которых можно описать потенциалом $U(r)$. При этом нас главным образом интересовали свойства спектра, а не волновых функций. Если при $r \rightarrow \infty$ потенциал взаимодействия обращается в нуль, то при $E > 0$ энергетический спектр будет непрерывным. При рассмотрении состояний непрерывного спектра нашей основной задачей будет отыскание волновых функций, удовлетворяющих определенным граничным условиям.

Решение стационарного УШ

$$\hat{H}\psi = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) \right] \psi = E\psi \quad (9.1)$$

при $r \rightarrow \infty$ имеет асимптотический вид ВФ свободного движения. Мы будем искать решения УШ (9.1), которые при $r \rightarrow \infty$ имеют вид суперпозиции плоской волны и расходящейся сферической волны:

$$\psi(\mathbf{r}) \approx e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \frac{f(\mathbf{n})}{r} e^{ikr}. \quad (9.2)$$

Здесь мы ввели *волновой вектор* \mathbf{k} , определяемый соотношениями

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (9.3)$$

Выберем ось сферической системы координат в направлении волнового вектора \mathbf{k} падающей волны. Тогда такую ВФ можно записать в виде

$$\psi_{\mathbf{k}}(r, \theta, \varphi) \approx e^{ikz} + f(k; \theta, \varphi) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (9.4)$$

Волновую функцию (9.2) можно интерпретировать, по аналогии с (3.40), (3.41) как суперпозицию ВФ падающей частицы с заданным импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, испущенной источником, удаленным на бесконечность, и ВФ частицы, рассеянной в центральном поле.

Поскольку гамильтониан \hat{H} инвариантен при поворотах вокруг оси z (принимаемой за ось сферической системы координат), то граничное условие также можно выбрать инвариантным:

$$\psi_{\mathbf{k}}(r, \theta, \varphi) \approx e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (9.5)$$

Волновые функции, имеющие асимптотический вид (9.5), будем называть волновыми функциями рассеяния, а задачу их отыскания — прямой задачей рассеяния*. Множитель $f(\theta)$ при расходящейся волне в ВФ рассеяния (9.5) называется *амплитудой рассеяния*.

1. Рассмотрим поток вероятности $\mathbf{j}(\mathbf{r})$, соответствующий волновой функции (9.4). По определению

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi\nabla\psi^* - \psi^*\nabla\psi). \quad (9.6)$$

В пределе $r \rightarrow \infty$, используя асимптотическое выражение для волновой функции и сохраняя лишь наиболее медленно убывающие члены, получаем

$$-i\hbar\nabla\psi_k \approx \hbar k n e^{ikr} + \hbar k v f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (9.7)$$

где

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}}{k}, \quad \mathbf{v} = \frac{\mathbf{r}}{r}.$$

Подставляя (9.7) в (9.6), находим

$$\frac{m}{\hbar}\mathbf{j} = k\mathbf{n} + \frac{1}{2} \frac{k}{r} (\mathbf{n} + \mathbf{v}) [f(\theta) e^{-i(kr - kr)} + f^*(\theta) e^{i(kr - kr)}] + k v \frac{|f(\theta)|^2}{r^2}. \quad (9.8)$$

Преобразуем второй член в (9.8). Для этого рассмотрим интеграл от него в интервале от $\theta = 0$ до $\theta = \pi$:

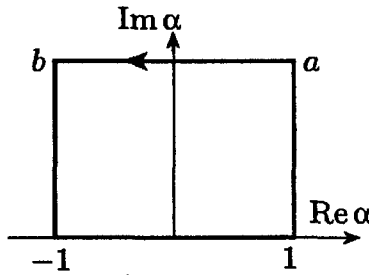


Рис. 30

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \int f(\theta) e^{ikr \cos \theta} d \cos \theta d\varphi = I(\alpha) \quad (\alpha = \cos \theta).$$

Рассмотрим контур, изображенный на рис. 30. При $r \rightarrow \infty$ интеграл по (a, b) мал; при вычислении интегралов по $(b, -1)$ и $(+1, a)$ можно вынести значение $f(\alpha)$ в точках $\alpha = -1$ и $\alpha = +1$ из-под знака интеграла, так как экспонента меняется значительно быстрее. Таким образом,

$$I(\alpha) = -f(+1) \frac{2\pi i}{kr} e^{ikr} + f(-1) \frac{2\pi i}{kr} e^{-ikr}.$$

Формально можно получить

$$\lim_{r \rightarrow \infty} e^{ikr\alpha} = \frac{2\pi i}{kr} [e^{-ikr} \delta(\alpha + 1) - e^{ikr} \delta(\alpha - 1)] \quad (9.9)$$

(только при интегрировании от $\alpha = -1$ до $\alpha = +1$). Подставляя (9.9) в (9.8), получим

$$\frac{m}{\hbar}\mathbf{j} = k\mathbf{n} - k\mathbf{n} \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(\theta) \frac{\delta(\mathbf{n} - \mathbf{v})}{r^2} + k v \frac{|f(\theta)|^2}{r^2}. \quad (9.10)$$

Таким образом, при $\mathbf{n} \neq \mathbf{v}$ полный ток ВФ рассеяния есть сумма токов падающей (плоской) волны и рассеянной (сферической) волны. Интерференции между падающей и рассеянной волнами нет. Полный поток, рассеянный в телесный угол $d\Omega$ (не включающий направление $\theta = 0$),

$$J_r d\Omega = j_r r^2 d\Omega = \frac{\hbar k}{m} |f(\theta)|^2 d\Omega.$$

Отношение полного потока вероятности ВФ рассеяния в элемент телесного угла $d\Omega$ к плотности потока в падающей плоской волне называется *дифференциальным сечением рассеяния*:

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega.$$

Учитывая, что источники частиц при конечных r отсутствуют, интегрируя (9.10) по поверхности большой сферы и переходя по теореме Гаусса

$$\int_S \mathbf{j} dS = \int_V \operatorname{div} \mathbf{j} dV$$

к интегралу по объему, получим

$$0 = -\frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(\mathbf{n}, \mathbf{n}) + \int |f(\mathbf{n}', \mathbf{n})|^2 d\Omega.$$

Интеграл в правой части называется *полным сечением рассеяния*:

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega.$$

Таким образом, получаем

$$\operatorname{Im} f(0) = \frac{k}{4\pi} \sigma. \quad (9.11)$$

Соотношение (9.11) называется *оптической теоремой*. Его физический смысл в том, что интерференция падающей волны с волной, рассеянной на нулевой угол, приводит к выбыванию частиц из падающей волны, что обеспечивает сохранение вероятности.

2. Стационарное УШ (9.1) может быть представлено в интегральной форме:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \chi(\mathbf{r}) + \int G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') \varphi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (9.12)$$

где $\chi(\mathbf{r})$ и $G^0(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — общее решение и ФГ для УШ свободного движения. Аналогичная форма радиального УШ рассматривалась в п. 5.11. По определению

$$(\Delta_r + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (9.13)$$

Как и в п. 5.11, будем искать ФГ в виде произведения линейно независимых решений $\chi(\mathbf{r})$. В качестве таких решений можно выбрать плоские волны

$$\begin{aligned} f(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \\ g(\mathbf{r}) &= e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (9.14)$$

Подставляя в (9.13) выражение для ФГ в форме

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int A(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d\mathbf{q},$$

получим

$$\int A(\mathbf{q})(k^2 - q^2) e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d\mathbf{q} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Это равенство выполняется тождественно, если

$$A(\mathbf{q}) = (2\pi)^{-3} (k^2 - q^2)^{-1}.$$

Производя в выражении

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{(k^2 - q^2)} d\mathbf{q}$$

интегрирование по угловым переменным, получим

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{i}{4\pi^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{q e^{iq|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{k^2 - q^2} dq. \quad (9.15)$$

Формула (9.15) не определяет ФГ однозначно. Отличный от нуля вклад дают только вычеты в полюсах подынтегрального выражения

$q = \pm k$. Направление обхода полюсов выбирается с помощью граничных условий. Решение (9.12) будет содержать расходящуюся волну, если обходить полюсы, как показано на рис. 31. Соответствующая ФГ обозначается $G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$:

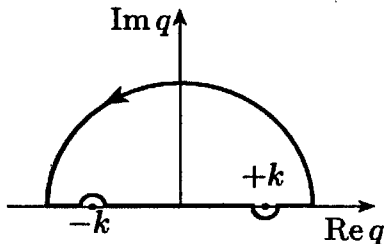


Рис. 31

$$G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (9.16)$$

Формально правило обхода можно задать, положив $k^2 = k^2 + i\epsilon$ и устремив ϵ к нулю после вычисления интеграла.

Итак, интегральное уравнение для ВФ рассеяния имеет вид

$$\psi(k, \mathbf{r}) = \varphi(k, \mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi(k, \mathbf{r}') d\mathbf{r}'.$$

Используя асимптотический вид ФГ (9.16):

$$G^+(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \approx -\frac{e^{ikr}}{4\pi r} e^{-ig\mathbf{r}'}, \quad \mathbf{g} = \frac{\mathbf{r}}{r} k,$$

получим асимптотическое выражение для $\psi(k, r)$:

$$\psi(k, r) \approx \varphi(k, r) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \frac{e^{ikr}}{r} \int e^{-ik\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}') \psi(k, \mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (9.17)$$

представляющее суперпозицию плоской и расходящейся волн в соответствии с условием (9.5).

3. При нахождении явного вида ФГ (9.15) мы использовали в качестве базиса СФ импульса (9.14), что вовсе не обязательно. ВФ рассеяния может быть представлена согласно (9.12) в виде

$$\psi_0 = \varphi + \hat{G}_0(E + i\epsilon) \hat{U} \psi, \quad (9.18)$$

где \hat{G}_0 — ФГ однородного УШ — есть

$$\hat{G}_0(E + i\epsilon) = (E + i\epsilon - \hat{H}_0)^{-1}.$$

Формальное решение УШ (9.18) фактически определяется интегральным уравнением. Выбрав в качестве базиса произвольную систему СФ гамильтониана $\hat{H}_0\{\varphi_\alpha\}$, можно представить (9.18) в виде

$$\psi_\alpha = \varphi_\alpha + \int \varphi_\beta \frac{\langle \varphi_\beta | \hat{V} | \varphi_\alpha \rangle}{E_\alpha - E_\beta + i\epsilon} d\beta,$$

где интегрирование проводится по всем возможным β .

Решение (9.18) можно выразить непосредственно через функции базиса φ_α . Введем ФГ неоднородного УШ (9.1):

$$\hat{G}(E) = (E - \hat{H})^{-1}.$$

Тогда

$$\hat{G}(E) = \hat{G}_0(E) + \hat{G}_0(E) \hat{U} \hat{G}(E). \quad (9.19)$$

Решение (9.18) принимает вид

$$\psi = \varphi + \hat{G}(E + i\epsilon) \hat{U} \varphi.$$

Уравнение (9.19) допускает формально решение методом итераций

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{U} \hat{G}_0 + \hat{G}_0 \hat{U} \hat{G}_0 \hat{U} \hat{G}_0 + \dots \quad (9.20)$$

4. Если потенциал взаимодействия $U(\mathbf{r})$ в некотором смысле мал, то в разложении (9.20) можно ограничиться нулевым приближением, положив $\hat{G} = \hat{G}_0$. Тогда из (9.19) следует:

$$f(\theta) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \varphi^*(k', \mathbf{r}) U(\mathbf{r}) \varphi(k, \mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Выбирая в качестве $\varphi(k, r)$ плоские волны, получим

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (9.21)$$

где \mathbf{q} есть изменение импульса при рассеянии:

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}', \quad |q| = 2k \sin \frac{\theta}{2}.$$

Разложение (9.20), использующее в качестве базиса систему СФ импульса, называется *борновским разложением*, а решение (9.19), использующее N членов разложения, — N -м борновским приближением. Решение при $N = 1$ будем называть просто *борновским приближением*. В случае центрального поля интегрирование по углам приводит к выражению

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r \frac{\sin qr}{q} U(r) dr. \quad (9.22)$$

Введем безразмерный параметр

$$\tau = ka,$$

где a — характерная длина потенциала. Для медленных частиц ($\tau \lesssim 1$) (9.22) принимает вид

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 U(r) dr. \quad (9.23)$$

Таким образом, амплитуда рассеяния медленных частиц не зависит ни от энергии, ни от направления. Для быстрых частиц ($\tau \gg 1$) заметный вклад в интеграл дает только область малых значений углов ($\theta \lesssim \tau^{-1}$) — окрестность главного максимума функции

$$\frac{\sin qr}{qr} = j_0(qr),$$

где $j_0(x)$ — сферическая функция Бесселя. Из этого следует, что быстрые частицы рассеиваются преимущественно вперед.

Необходимым условием применимости борновского приближения является малость интегрального члена — поправки к ВФ

$$\varphi^{(1)}(k, \mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{i\mathbf{k}r'}}{r'} U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi_k(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (9.24)$$

по сравнению с невозмущенной ВФ $\varphi_0(k, r)$. Для медленных частиц можно оценить интеграл в (9.24), положив $e^{i\mathbf{k}r'} \approx 1$, тогда

$$\varphi^{(1)}(k, r) \sim \frac{m}{\hbar^2} a^2 U_0 \varphi_k^{(0)}(r),$$

и условие применимости борновского приближения есть

$$B \ll 1 \quad (\tau \lesssim 1), \quad (9.25)$$

где B — борновский параметр (3.12). Для быстрых частиц вклад в интеграл (9.24) дает не область $\Delta\theta \sim 1$, как в случае рассеяния медленных частиц (изотропного), а область $\Delta\theta \sim \tau^{-1}$. Поэтому

$$\varphi^{(1)}(k, r) \sim \frac{m}{\hbar^2} a^2 U_0 \frac{1}{\tau} \varphi_k^{(0)},$$

и борновское приближение применимо при условии

$$B \ll 1/\tau \quad (\tau \gg 1). \quad (9.26)$$

Таким образом, ограничение на величину B , характеризующую потенциал, гораздо слабее для быстрых частиц. Достаточным условием применимости борновского приближения является сходимость ряда (9.20).

Существенным недостатком борновского приближения является действительность амплитуды $f(\theta)$, несовместимая с оптической теоремой (9.11). Иными словами, в борновском приближении область, в которой потенциал $U(r)$ заметным образом отличен от нуля, действует как источник частиц.

5. Рассмотрим приближенный метод для вычисления амплитуды рассеяния частиц высокой энергии

$$E \gg U_0. \quad (9.27)$$

При этом условии потенциал $U(\mathbf{r})$ можно рассматривать как возмущение. Представим ВФ в виде

$$\psi(k, \mathbf{r}) = e^{ikz} \Phi(\mathbf{r}), \quad (9.28)$$

где $\Phi(\mathbf{r})$ — амплитуда, медленно меняющаяся вдоль оси z ($d\Phi/dz \ll \ll k$). Подставляя (9.28) в УШ и сохраняя только главные члены, получим уравнение первого порядка

$$2ik \frac{d\Phi}{dz} = \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}) \Phi. \quad (9.29)$$

Решение (9.29), имеющее асимптотикой при $z \rightarrow -\infty$ плоскую волну, есть

$$\psi(k, \mathbf{r}) = \exp i \left[kz - \frac{m}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z U(\mathbf{r}) dz \right]. \quad (9.30)$$

Используя формулу (9.17), амплитуду рассеяния представим в виде

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r} e^{ikz - ik'\mathbf{r}'\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \exp \left[-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z U(\mathbf{r}) dz \right].$$

Так как рассеяние быстрых частиц происходит преимущественно на малые углы, то вектор переданного импульса можно считать перпендикулярным к импульсу падающей частицы:

$$-ik'\mathbf{r} + ikz = i\mathbf{q}_\perp \boldsymbol{\rho} + i(kz \cos \theta - kz) \approx i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}.$$

Здесь $\boldsymbol{\rho}$ означает вектор в плоскости xy . Итак,

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\boldsymbol{\rho} e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}} \int_{-\infty}^{+\infty} dz U(\mathbf{r}) \exp\left[-\frac{im}{\hbar^2 k} \int_{-\infty}^z U(\mathbf{r}) dz\right].$$

Интегрирование по z приводит к выражению

$$f(\theta) = -\frac{ik}{2\pi} \int e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}} (e^{2i\delta(\boldsymbol{\rho})} - 1) d\boldsymbol{\rho}, \quad (9.31)$$

где

$$\delta(\boldsymbol{\rho}) = -\frac{m}{2\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{+\infty} U(\mathbf{r}) dz.$$

В центральном поле фаза δ зависит лишь от величины, но не от направления вектора $\boldsymbol{\rho}$. Введем в плоскости xy полярные координаты ρ, φ . Тогда, учитывая соотношение

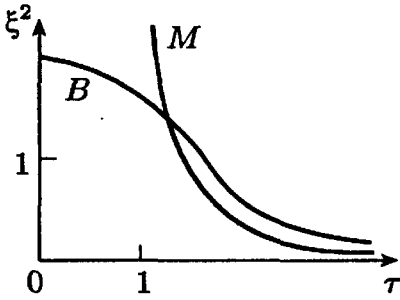


Рис. 32

$$\int_0^{2\pi} e^{ix \cos \varphi} d\varphi = 2\pi J_0(x),$$

в формуле (9.31) можно произвести интегрирование по φ . Окончательное выражение имеет вид

$$f(\theta) = -ik \int_0^\infty \rho J_0\left(2k\rho \sin \frac{\theta}{2}\right) (e^{2i\delta(\rho)} - 1) d\rho. \quad (9.32)$$

Выражение (9.32) называется *приближением Мольера** для амплитуды рассеяния. Условие применимости метода в безразмерных переменных имеет вид

$$\tau \gg 1, \quad B \ll \tau^2. \quad (9.33)$$

Из сравнения с (9.26) видно, что для описания рассеяния быстрых частиц приближение Мольера имеет область применимости большую, чем приближение Борна. Области применимости приближений Борна и Мольера ограничены на рис. 32 сверху кривыми B

и M соответственно. Борновскому приближению соответствует случай, когда показатель экспоненты в (9.31) мал:

$$\frac{m}{\hbar^2 k} U_0 a = B\tau^{-1} \ll 1.$$

Раскладывая экспоненту в (9.31) до линейного по δ члена, возвращаемся к (9.21).

6. В предыдущем изложении основную роль играли базисные СФ импульса — плоские волны. Другой часто используемый базис — общие СФ операторов \hat{p}^2 , \hat{l}^2 , \hat{l}_z — сферические волны. Радиальное УШ для свободной частицы с моментом l имеет вид

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] \psi_l^{(0)}(r) = 0. \quad (9.34)$$

В качестве независимой пары решений (9.34) можно выбрать сферические функции Бесселя $j_l(kr)$ и Неймана $n_l(kr)$

$$j_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{l+1/2}(z), \quad n_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} N_{l+1/2}(z)$$

или же сферические функции Ханкеля 1-го и 2-го рода

$$h_l^\pm(z) = j_l(z) \pm i n_l(z).$$

При $z \gg 1$, $z > l$ справедливы асимптотические формулы

$$j_l(z) \approx \frac{\sin(z - l\pi/2)}{z}, \quad n_l(z) \approx -\frac{\cos(z - l\pi/2)}{z}. \quad (9.35)$$

Асимптотики ВФ непрерывного спектра частицы с моментом l в центральном поле $U(r)$ также можно представить в виде, аналогичном (9.35). Рассмотрим ВКБ-решения: они заведомо дают хорошее приближение на больших расстояниях от точки поворота. Напомним, что вещественная точка поворота существует в любом потенциале $U(r)$ таком, что при $r \rightarrow 0$ $-u(r) < (2r)^{-2}$. ВКБ-решение, согласно (7.45), есть

$$\psi_l(r) \approx \frac{1}{r} \sin \left[\int_{r_0}^r \sqrt{k^2 - \frac{\lambda^2}{r^2} - u(r)} dr + \frac{\pi}{4} \right]. \quad (9.36)$$

Выберем некоторое r_1 так, что

$$k^2 \gg \frac{\lambda^2}{r_1^2} + u(r_1).$$

Тогда при $r > r_1$ подынтегральное выражение можно представить в виде

$$\sqrt{k^2 - \left[\frac{\lambda^2}{r^2} + u(r) \right]} \approx k - \frac{u(r)}{2k} - \frac{\lambda^2}{2kr^2}$$

и асимптотика функции (9.36) может быть представлена в виде

$$\psi_l(r) \sim \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right), \quad (9.37)$$

где фаза

$$\delta_l \approx -kr_1 + \int_{r_0}^{r_1} \sqrt{k^2 - \frac{\lambda^2}{r^2} - u(r)} dr + \frac{\lambda\pi}{2} - \\ - \frac{1}{2k} \int_{r_1}^r u(r) dr + \frac{\lambda^2}{2k} \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_1} \right). \quad (9.38)$$

Выделение в аргументе (9.37) слагаемого $-l\pi/2$ связано с тем, что при $l \gg 1$ при вычислении первого интеграла в (9.38) можно пренебречь $u(r)$ по сравнению с $\lambda^2 r^{-2}$, тогда значение первообразной на нижнем пределе равно $\lambda\pi/2$ и от интеграла остается только некоторая ограниченная функция r_1 . В частности, при $u(r) = 0$ $\delta_l = 0$ в согласии с (9.35). Необходимым условием конечности фазы δ_l является достаточно быстрое убывание потенциала: $u(r) = o(r^{-1})$ при $r \rightarrow \infty$. Для кулоновского потенциала $U(r) = \alpha r^{-1}$ второй интеграл в (9.38) расходится логарифмически:

$$\delta_l \approx \alpha \ln r. \quad (9.39)$$

7. Граничное условие для ВФ рассеяния не обладает центральной симметрией, так как содержит СФ импульса — плоскую волну. Разложим плоскую волну в направлении оси z по полной системе СФ момента:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) j_l(kr). \quad (9.40)$$

Заметим, что из-за аксиальной симметрии в разложение (9.40) вошли только сферические гармоники с $m = 0$

$$P_l(\cos \theta) = \sqrt{\frac{\pi}{2l+1}} Y_{l0}(\theta).$$

Общий вид аксиально-симметрического решения УШ при больших r , с учетом (9.37), есть

$$\psi_l(r) \approx \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) A_l P_l(\cos \theta) \frac{1}{kr} \sin \left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l \right) \approx \\ \approx \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) A_l P_l(\cos \theta) \frac{i}{2kr} \left[e^{-i(kr - l\pi/2 + \delta_l)} - e^{i(kr - l\pi/2 + \delta_l)} \right].$$

Асимптотический вид (9.40), согласно (9.35), есть

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \frac{i}{2kr} \left[e^{-i(kr-l\pi/2)} - e^{i(kr-l\pi/2)} \right].$$

Потребуем, чтобы разность

$$\psi - e^{ikz} \sim \frac{e^{ikr}}{r}$$

содержала только члены, соответствующие расходящейся волне. Для этого должно быть

$$A_l = i^l e^{i\delta_l}.$$

Таким образом, асимптотическое выражение для ВФ рассеяния можно представить в виде

$$\psi \approx \frac{i}{2kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) [(-1)^l e^{-ikr} - S_l e^{ikr}], \quad (9.41)$$

где введено обозначение

$$S_l = e^{2i\delta_l}. \quad (9.42)$$

Коэффициент при расходящейся волне в разности $\psi - e^{ikz}$ есть введенная нами ранее амплитуда рассеяния

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) (S_l - 1) P_l(\cos \theta). \quad (9.43)$$

Это выражение называется *формулой Факсена-Хольтсмарка*.

Дифференциальное сечение рассеяния имеет вид

$$d\sigma = |f(\theta)|^2 d\Omega = \frac{1}{4k^2} \sum_{l_1, l_2} (2l_1+1)(2l_2+1) \times \\ \times P_{l_1}(\cos \theta) P_{l_2}(\cos \theta) |S_{l_1} - 1| |S_{l_2} - 1| d\Omega. \quad (9.44)$$

Интегрирование по углу φ сводится к умножению на 2π . Интегрируя (9.44) по углу θ с учетом равенства

$$\int_0^\pi P_k(\cos \theta) P_l(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \frac{2}{2l+1} \delta_{kl},$$

получим выражение для полного эффективного сечения рассеяния:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (9.45)$$

Таким образом, полное сечение рассеяния (в отличие от дифференциального (9.44)) есть сумма *парциальных сечений* рассеяния с заданным l :

$$\sigma_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1) \sin^2 \delta_l. \quad (9.46)$$

Парциальное сечение можно выразить через *парциальные амплитуды* рассеяния, определяемые соотношением

$$f(\theta) = \sum_l f_l (2l + 1) P_l(\cos \theta). \quad (9.47)$$

Из сравнения с (9.43) находим

$$f_l = \frac{1}{2ik} (S_l - 1) = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1),$$

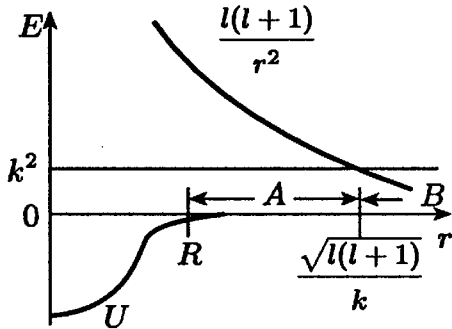
а из (9.46) получим выражение для парциальных сечений через парциальные амплитуды:

$$\sigma_l = 4\pi(2l + 1) |f_l|^2.$$

8. Рассмотрим радиальное УШ в поле с короткодействующим потенциалом $U(r)$

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} - u(r) + k^2 \right] \psi_l(r) = 0. \quad (9.48)$$

Рассмотрим рассеяние медленных частиц ($\tau \ll 1$). Тогда в области A (рис. 33) (при $r > R$), где



$$\frac{l(l+1)}{r^2} \gg k^2,$$

в уравнении (9.48) можно пренебречь и потенциалом $U(r)$, и членом k^2 . Решение в области A , согласно (5.6), имеет вид

$$\psi_l^A = c_1 r^l + c_2 r^{-(l+1)}. \quad (9.49)$$

Рис. 33

В области B ($r \gtrsim k^{-1} \sqrt{l(l+1)}$) становится существенным член с k^2 и УШ превращается в уравнение для свободной частицы с энергией k^2 и моментом l . Его решение, согласно п. 9.6, можно представить в виде

$$\psi_l^B = A_1 j_l(kr) + A_2 n_l(kr).$$

Асимптотики сферических функций Бесселя при малых z суть

$$j_l(z) \approx \frac{z^l}{(2l+1)!!}, \quad n_l(z) \approx -\frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}}. \quad (9.50)$$

Потребуем, чтобы в области A решение ψ^B переходило в ψ^A . Тогда

$$A_1 = c_1 \frac{(2l+1)!!}{k^l}, \quad A_2 = -c_2 \frac{k^{l+1}}{(2l-1)!!}.$$

Используя асимптотики функций Бесселя при больших z (9.35), найдем

$$\psi_l^B \approx c_1 \frac{(2l+1)!!}{k^{l+1}} \frac{1}{r} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right) + c_2 \frac{k^l}{(2l-1)!!} \frac{1}{r} \cos\left(kr - \frac{l\pi}{2}\right).$$

Это выражение можно представить в виде

$$\psi_l \approx \frac{1}{r} \sin\left(kr - \frac{l\pi}{2} + \delta_l\right), \quad (9.51)$$

где

$$\operatorname{tg} \delta_l = \frac{c_1}{c_2} \frac{k^{2l+1}}{(2l-1)!!(2l+1)!!}. \quad (9.52)$$

Из выражения (9.52) видно, что при достаточно больших l при данном k $\operatorname{tg} \delta_l \approx \delta_l$ стремится к нулю. Парциальные амплитуды

$$f_l = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) \approx \frac{\delta_l}{k}.$$

Отсюда в предельном случае малых k

$$f_l \approx k^{2l}.$$

Таким образом, при рассеянии медленных частиц ($\tau \ll 1$) все парциальные амплитуды с $l \neq 0$ малы по сравнению с амплитудой рассеяния s -волны ($l = 0$). Поскольку $P_0(\cos \theta) = 1$, рассеяние медленных частиц изотропно. В п. 9.4 мы пришли к такому выводу в рамках борновского приближения. Отметим, что выполнение условия малости фаз δ_l при $l \neq 0$ облегчается из-за больших числовых множителей в знаменателе (9.52). Даже при $\tau \sim 1$

$$\delta_0 \approx 9\delta_1 \approx 225\delta_2.$$

9. Задача о рассеянии медленной частицы на короткодействующем потенциале представляет интерес как модель для описания рассеяния нуклонов. Характерный размер межнуклонного потенциала $a \sim 2 \cdot 10^{-13}$ см; частицы будут медленными при $E \lesssim 5$ МэВ. Для рассеяния медленных частиц малых энергий свойства короткодействующих потенциалов можно достаточно полно описать двумя параметрами: длиной рассеяния \tilde{a} и эффективным радиусом r_0 .

Рассмотрим УШ при $l = 0$:

$$\frac{d^2 \varphi}{dr^2} + [k^2 - u(r)]\varphi = 0. \quad (9.53)$$

Пусть $\varphi_1(r)$ и $\varphi_2(r)$ — решения (9.53) при $E = k_1^2$ и $E = k_2^2$,

удовлетворяющие граничным условиям в нуле и имеющие асимптотики

$$\begin{aligned}\varphi_1(r) &\rightarrow \frac{1}{\sin \delta_1} \sin(k_1 r + \delta_1), \\ \varphi_2(r) &\rightarrow \frac{1}{\sin \delta_2} \sin(k_2 r + \delta_2).\end{aligned}\quad (9.54)$$

Из (9.53) следует:

$$\left(\varphi_2 \frac{d\varphi_1}{dr} - \varphi_1 \frac{d\varphi_2}{dr} \right) \Big|_0^R = (k_2^2 - k_1^2) \int_0^R \varphi_1 \varphi_2 dr, \quad (9.55)$$

где величина R произвольна. Пусть χ_1, χ_2 — решения УШ свободного движения, совпадающие с асимптотиками (9.54). Тогда

$$\left(\chi_2 \frac{d\chi_1}{dr} - \chi_1 \frac{d\chi_2}{dr} \right) \Big|_0^R = (k_2^2 - k_1^2) \int_0^R \chi_1 \chi_2 dr. \quad (9.56)$$

Вычитая (9.56) из (9.55) и переходя к пределу при $R \rightarrow \infty$, получаем

$$k_2 \operatorname{ctg} \delta_2 - k_1 \operatorname{ctg} \delta_1 = (k_2^2 - k_1^2) \int_0^R (\chi_1 \chi_2 - \varphi_1 \varphi_2) dr. \quad (9.57)$$

Предел амплитуды рассеяния при $k \rightarrow 0$, взятый с обратным знаком, называется *длиной рассеяния*:

$$-\frac{1}{\bar{a}} = \lim_{k \rightarrow 0} [k \operatorname{ctg} \delta(k)].$$

Полагая в (9.57) $k_2 = k, k_1 \rightarrow 0$, получаем

$$k \operatorname{ctg} \delta = -\frac{1}{\bar{a}} + \frac{r_0}{2} k^2,$$

где

$$r_0 = 2 \int_0^\infty (\chi_0 \chi - \varphi_0 \varphi) dr. \quad (9.58)$$

Поскольку асимптотики φ и φ_0 , χ и χ_0 совпадают, интеграл (9.58) определяется главным образом областью, в которой $U(r)$ имеет заметную величину. При $\tau \lesssim 1$ в этой области ВФ не будет сильно зависеть от k^2 , и можно положить (с точностью до членов $\sim k^2$) $\varphi \approx \varphi_0, \chi \approx \chi_0$. Тогда

$$k \operatorname{ctg} \delta = -\frac{1}{\bar{a}} + \frac{r_0}{2} k^2,$$

где величина

$$r_0 = 2 \int_0^{\infty} (\chi_0^2 - \varphi_0^2) dr \quad (9.59)$$

называется *эффективным радиусом* потенциала $U(r)$. Полное сечение σ , выраженное через длину рассеяния a и эффективный радиус r_0 , имеет вид

$$\sigma = 4\pi\tilde{a}^2 \left[1 + \tilde{a}(\tilde{a} - r_0)k^2 + \left(\frac{1}{2}r_0\tilde{a}\right)^2 k^4 \right]^{-1}.$$

В пределе при $k \rightarrow 0$ получаем

$$\sigma = 4\pi\tilde{a}^2.$$

Знак длины рассеяния зависит от параметров потенциальной ямы.

10. Рассмотрим рассеяние на сферическом потенциале:

$$\begin{aligned} U(r) &= U_0 \quad (r < a), \\ U(r) &= 0 \quad (r > a). \end{aligned} \quad (9.60)$$

Знак и абсолютная величина U_0 произвольны. Уравнение Шредингера во внешней области:

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right] \psi_l(r) = 0.$$

Во внутренней области:

$$\left[\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} + q^2 \right] \varphi_l(r) = 0,$$

где $q^2 = k^2 - U_0$. Рассмотрим вначале случай $q^2 > 0$ (потенциал притяжения или слабого отталкивания). Тогда решение $\varphi_l(r)$, конечное при $r \rightarrow 0$, во внутренней области есть

$$\varphi_l(r) = C j_l(qr).$$

Вне ямы

$$\psi_l(r) = A j_l(kr) + B n_l(kr).$$

Из граничного условия на бесконечности имеем

$$A = 4\pi i^l e^{i\delta_l} \cos \delta_l,$$

$$B = -4\pi i^l e^{i\delta_l} \sin \delta_l.$$

Потребуем равенства функций и логарифмических производных в точке a . Тогда из первого условия следует

$$C = 4\pi i^l e^{i\delta_l} \cos \delta_l \frac{j_l(\tau) - \operatorname{tg} \delta_l \cdot n_l(\tau)}{j_l(\theta)}.$$

Из второго условия имеем

$$q \frac{j'_i(\theta)}{j_i(\theta)} = k \frac{j'_i(\tau) - \operatorname{tg} \delta_l \cdot n'_i(\tau)}{j_i(\tau) + \operatorname{tg} \delta_l \cdot n_i(\tau)},$$

где

$$\theta = qa, \quad \tau = ka.$$

Ограничимся случаем медленных частиц ($\tau \lesssim 1$). Тогда основную роль играет рассеяние s -волны. Решение однородного уравнения Шредингера:

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x}.$$

Отсюда

$$\varphi_0(r) = C \frac{\sin qr}{r}, \quad \psi_0(r) = 4\pi e^{i\delta_0} \frac{\sin(kr + \delta_0)}{kr}.$$

Условие сшивания дает

$$q \operatorname{ctg} \theta = k \operatorname{ctg} (\tau + \delta_0),$$

откуда

$$\delta_0 = \operatorname{arctg} \left(\frac{k}{q} \operatorname{tg} \theta \right) - \tau,$$

или

$$\operatorname{tg} \delta_0 = \frac{(k/q) \operatorname{tg} \theta - \operatorname{tg} \tau}{1 + (k/q) \operatorname{tg} \theta \operatorname{tg} \tau}. \quad (9.61)$$

а) Рассмотрим случай ямы малой глубины: $|u_0| \ll k^2$, $q \approx k$. Тогда, учитывая асимптотики при малых x

$$\operatorname{tg} x \approx x + \frac{x^3}{3}, \quad \operatorname{arctg} x \approx x - \frac{x^3}{3},$$

для рассеяния медленных частиц получим, сохраняя в разложении члены до третьего порядка,

$$\delta_0 = \tau + \frac{\tau\theta^2}{3} - \frac{\tau^3}{3} - \tau \approx \frac{k(q^2 - k^2)}{3} a^3,$$

или

$$\delta_0 = -k \frac{u_0 a^3}{3}.$$

Длина рассеяния (парциальная амплитуда s -волны)

$$\tilde{a} = \frac{u_0 a^3}{3}.$$

Для ямы малой глубины знак длины рассеяния совпадает со знаком потенциала. Сечение

$$\sigma = 4\pi \tilde{a}^2 = \pi \cdot \frac{4}{9} B^2 a^2$$

не зависит от энергии.

б) Рассмотрим случай потенциала сильного притяжения

$$u_0 < 0, \quad |u_0| \gg k^2.$$

Тогда

$$\frac{k}{q} \approx \frac{k}{\sqrt{u_0}} \ll 1, \quad \text{tg } \tau \ll 1$$

и в знаменателе (9.61) можно пренебречь вторым членом по сравне-

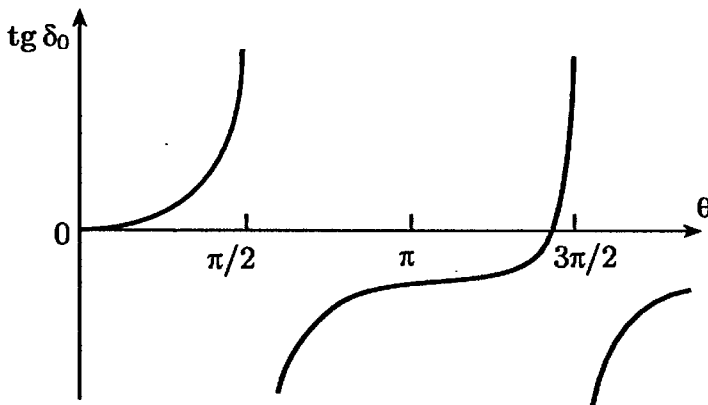


Рис. 34

нию с единицей. Положив $\text{tg } \tau \approx \tau$, получаем

$$\text{tg } \delta_0 \approx \tau \left(\frac{\text{tg } \theta}{\theta} - 1 \right).$$

Рассмотрим зависимость $\text{tg } \delta_0$ от θ (рис. 34). При значениях θ_V , определяемых условием

$$\theta_V = (2n + 1) \frac{\pi}{2}, \tag{9.62}$$

сечение достигает максимального значения

$$\bar{\sigma} = \frac{4\pi}{k^2}.$$

Значения k^2 , соответствующие максимальным сечениям:

$$k^2 = \frac{1}{a^2} \left[(2n + 1)^2 \frac{\pi^2}{4} \right] - u_0,$$

называются *виртуальными уровнями энергии*. Если $k \rightarrow 0$, то условие (9.62) выполняется при

$$\sqrt{u_0} a = (2n + 1) \frac{\pi}{2}.$$

Это выражение совпадает с условием возникновения связанного s -состояния в сферической яме. Виртуальный уровень имеет в этом случае нулевую энергию, а длина рассеяния обращается в бесконечность.

При некоторых значениях θ_R , таких что

$$\operatorname{tg} \theta_R = \theta_R, \quad (9.63)$$

фазовый сдвиг и сечение рассеяния обращаются в нуль. Явление, состоящее в резком уменьшении сечения рассеяния медленных частиц при некоторых k , называется *эффектом Рамзауэра*. Эффект был обнаружен экспериментально при наблюдении рассеяния электронов на атомах инертного газа. Хотя эффективный потенциал взаимодействия электрона с нейтральным атомом не является короткодействующим в смысле определения, данного в п. 9.5 ($u(R) \sim R^{-4}$ при $R \rightarrow \infty$), но вывод п. 9.8 о доминирующей роли s -рассеяния при малых k остается в силе, так как требует лишь более быстрого убывания потенциала $u(r)$ по сравнению с r^{-3} . Для волн с $l \neq 0$ условием применимости (9.52) является

$$U(r) = o[r^{-(2l+3)}].$$

Только в этом случае в области A законно пренебрежение членом $U(r)R_l(r) \sim U_0 c_1 r^l$ по сравнению с членом $l(l+1)r^{-2}R_l \sim l(l+1)r^{-l-3}$. Отметим, что эффект Рамзауэра имеет место при значениях q_R , близких к значениям q_V для виртуальных уровней. При заданном k с ростом глубины ямы значения θ_R и θ_V становятся близки

$$\theta_{V1} = \frac{\pi}{2} \approx 1,57, \quad \theta_{R1} \approx 4,49, \quad \theta_{V2} \approx \frac{3\pi}{2} \approx 4,71.$$

В области

$$\theta_{R(N-1)} < \sqrt{u_0} a < \theta_{VN}$$

длина рассеяния положительна. Напомним, что все результаты относятся к случаю малых k . При этом значения q могут быть, понятно, сколь угодно большими.

в) Рассмотрим случай $q^2 < 0$ (потенциал сильного отталкивания). Тогда во внутренней области

$$\varphi_0(r) = C \frac{e^{\varkappa r} - e^{-\varkappa r}}{\varkappa r}.$$

Условие сшивания решений дает уравнение для определения фазы

$$\varkappa \operatorname{cth} \varkappa a = k \operatorname{ctg} (\tau + \delta_0),$$

$$\delta_0 = \operatorname{arctg} \left(\frac{k}{\varkappa} \operatorname{th} \varkappa a \right) - \tau.$$

Для рассеяния медленных частиц ($\tau \ll 1$, $k^2 \ll u_0$)

$$\delta_0 \approx -\tau.$$

Интегральное сечение рассеяния

$$\sigma_0 = 4\pi a^2 \left(\frac{\operatorname{th} \varkappa a}{\varkappa a} - 1 \right)^2. \quad (9.64)$$

В пределе $(k^2/u_0) \rightarrow 0$ условие медленности частиц $\tau \lesssim 1$ становится несущественным. Для рассеяния на непроницаемой сфере ($u_0 \rightarrow \infty$)

$$\sigma_0 = 4\pi a^2,$$

что в четыре раза превышает классическое значение.

11. При рассмотрении в предыдущем пункте рассеяния медленных частиц на сферическом потенциале мы видели, что величина сечения тесно связана с положением уровней дискретного спектра. Единным образом состояния дискретного и непрерывного спектров можно рассматривать, считая k комплексной величиной. В этом пункте мы получим интегральное уравнение для парциальных ВФ рассеяния, которое послужит основой для дальнейшего рассмотрения.

Найденная в п. 9.2 ФГ для свободного движения может быть представлена в виде

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', k^2) = (2\pi)^{-3} \int q^2 dq G_0(q^2, k^2) \int d\mathbf{a} e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}. \quad (9.65)$$

В последнем интеграле используем формулу для разложения плоской волны

$$e^{iz \cos \theta} = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} \sum (2l + 1) i^l J_\lambda(z) P_l(\cos \theta),$$

где $\lambda = l + 1/2$. Тогда получаем

$$\begin{aligned} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', k^2) &= (2\pi)^{-3} \int_0^\infty q^2 dq G_0(q^2, k^2) \frac{\pi}{2q\sqrt{rr'}} \times \\ &\times \int d\mathbf{a} \left[\sum (2l + 1) i^l J_\lambda(qr) P_l(\mathbf{na}) \right] \times \\ &\times \left[\sum (2l_1 + 1) (-1)^{l_1} J_{\lambda_1}(qr'_1) P_{l_1}(\mathbf{an}'_1) \right]. \end{aligned}$$

Интегрирование по угловым переменным можно провести, используя теорему сложения для полиномов Лежандра:

$$\begin{aligned} G_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}', k^2) &= (2\pi)^{-3} \frac{\pi}{2\sqrt{rr'}} \int_0^\infty q dq G_0(q^2, k^2) \times \\ &\times \sum_{l, l_1} (2l + 1)(2l_1 + 1) i^l (-i)^{l_1} J_\lambda(qr) J_{\lambda_1}(qr') \cdot \frac{4\pi}{2l + 1} \delta_{ll_1} P_l(\mathbf{n}'\mathbf{n}). \end{aligned}$$

Таким образом, ФГ для свободной частицы может быть представлена

в виде суммы парциальных ФГ:

$$G_0^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}', k^2) = -\frac{1}{4\pi\sqrt{rr'}} \sum (2l + 1) \tilde{G}_l^+(r, r', k^2) P_l(\mathbf{nn}'),$$

$$\tilde{G}_l^+(r, r', k^2) = -\int_0^\infty q dq \frac{J_\lambda(qr) J_\lambda(qr')}{q^2 - k^2 - i\varepsilon} = -\frac{\pi i}{2} H_\lambda^{(1)}(kr) J_\lambda(kr').$$
(9.66)

Здесь $H_\lambda^{(1)}(z)$ — первая функция Ханкеля.

Пусть $\psi^+(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ есть решение уравнения Шредингера, удовлетворяющее граничным условиям задачи рассеяния. Разложим $\psi^+(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ по парциальным волнам:

$$\psi^+(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} \sum (2l + 1) i^l \psi_l^+(kr) P_l(\mathbf{nn}').$$

Тогда парциальная ВФ $\psi_l^+(kr)$ удовлетворяет интегральному уравнению

$$\psi_l^+(kr) = J_\lambda(kr) + \int_0^\infty r' \tilde{G}_l^+(r, r', k) u(r') \psi_l^+(kr') dr'.$$

Используя явный вид парциальной ФГ (9.66), получаем интегральное уравнение

$$\psi_l^+(kr) = J_\lambda(kr) - \frac{\pi i}{2} H_\lambda^{(1)}(kr) \int_0^r r' J_\lambda(kr') u(r') \psi_l^+(kr') dr' -$$

$$- \frac{\pi i}{2} J_\lambda(kr) \int_r^\infty r' H_\lambda^{(1)}(kr') u(r') \psi_l^+(kr') dr'. \quad (9.67)$$

12. Рассмотрим асимптотику волновой функции $\psi_l^+(kr)$. При больших r

$$\psi_l^+(kr) \underset{r \rightarrow \infty}{\approx} J_\lambda(kr) - \frac{\pi i}{2} H_\lambda^{(1)}(kr) \int_0^\infty r' J_\lambda(kr') u(r') \psi_l^+(kr') dr'.$$

Используя асимптотическое выражение для функции Ханкеля

$$H_\lambda^{(1)} \approx \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp\left(iz - i\frac{\pi\lambda}{2} - i\frac{\pi}{4}\right),$$

получаем

$$\psi_l^+(kr) \approx J_\lambda(kr) - \frac{\pi i}{2} \sqrt{\frac{2}{\pi kr}} (-i)^{l+1} e^{ikr} \int_0^\infty r' J_\lambda(kr') u(r') \psi_l^+(kr') dr'.$$

Асимптотическое при больших r выражение для ВФ рассеяния через парциальные волны имеет вид

$$\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \approx e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \frac{\pi}{2} \frac{e^{ikr}}{r} \sum (2l + 1) P_l(\mathbf{nn}') \times \left[\int_0^\infty r J_\lambda(kr) u(r) \psi_l^+(kr) dr \right].$$

Определяя парциальные амплитуды рассеяния $f_l(k)$ соотношением

$$f(\mathbf{nn}') = \frac{1}{k} \sum_l (2l + 1) f_l(k) P_l(\mathbf{nn}'),$$

получаем для них выражение

$$f_l(k) = -\frac{\pi}{2} \int_0^\infty r J_\lambda(kr) u(r) \psi_l^+(kr) dr. \quad (9.68)$$

Рассмотрим асимптотическое поведение функций $\psi_l^+(kr)$ при малых r :

$$\psi_l^+(kr) \approx J_\lambda(kr) \left[1 - \frac{\pi i}{2} \int_0^\infty r H_\lambda^{(1)}(kr) u(r) \psi_l^+(kr) dr \right]. \quad (9.69)$$

Пусть $\varphi_l(kr)$ — функция, удовлетворяющая интегральному уравнению

$$\begin{aligned} \varphi_l(kr') = J_\lambda(kr) - \frac{\pi i}{4} H_\lambda^{(1)}(kr) \int_0^r H_\lambda^{(2)}(kr') u(r') \varphi_l(kr') r' dr' + \\ + \frac{\pi i}{4} H_\lambda^{(2)}(kr) \int_0^r H_\lambda^{(1)}(kr') u(r') \varphi_l(kr') r' dr'. \end{aligned} \quad (9.70)$$

Функция $\varphi_l(kr)$ действительна и удовлетворяет тому же дифференциальному уравнению

$$f'' + \frac{1}{r} f' + \left(k^2 - \frac{\lambda^2}{r^2} \right) f = u(r) f,$$

что и решение $\psi_l^+(kr)$. При малых r

$$\varphi_l(kr) \approx J_\lambda(kr).$$

Таким образом, функция $\varphi_l(kr)$ представляет регулярное в нуле действительное решение радиального УШ. Функция $\psi_l^+(kr)$ также регулярна в нуле, поэтому эти два решения должны быть пропорциональны:

$$\psi_l^+(kr) = c_l \varphi_l(kr).$$

Подставляя это равенство в (9.69), находим

$$c_l = \left[1 + \frac{\pi i}{2} \int_0^\infty r H_\lambda^{(1)}(kr) u(r) \varphi_l(kr) dr \right]^{-1}.$$

Выражение для парциальной амплитуды рассеяния через действительное регулярное решение УШ имеет вид

$$f_l = -\frac{\pi}{2} \frac{\int_0^\infty r J_\lambda(kr) u(r) \varphi_l(kr) dr}{1 + i \frac{\pi}{2} \int_0^\infty r H_\lambda^{(1)}(kr) u(r) \varphi_l(kr) dr}. \quad (9.71)$$

Элемент S -матрицы связан с амплитудой соотношениями

$$f_l = \frac{1}{2i} (S_l - 1). \quad (9.72)$$

Таким образом,

$$S_l(k) = \frac{1 - i \frac{\pi}{2} \int_0^\infty r H_\lambda^{(2)}(kr) \varphi_l(kr) u(r) dr}{1 + i \frac{\pi}{2} \int_0^\infty r H_\lambda^{(1)}(kr) \varphi_l(kr) u(r) dr}. \quad (9.73)$$

13. Пусть $k^2 = -\alpha^2$ — значение энергии, соответствующее связанному состоянию. Тогда при $k = \pm i\alpha$ регулярное действительное решение УШ должно убывать при $r \rightarrow \infty$. Согласно (9.70) асимптотический вид такого решения есть

$$\begin{aligned} \varphi_l(kr') \approx & J_\lambda(kr') - \frac{\pi i}{4} H_\lambda^{(1)}(kr') \int_0^\infty H_\lambda^{(2)}(kr') u(r') \varphi_l(kr') r' dr' + \\ & + \frac{\pi i}{4} H_\lambda^{(2)}(kr') \int_0^\infty H_\lambda^{(1)}(kr') u(r') \varphi_l(kr') r' dr'. \end{aligned} \quad (9.74)$$

Учитывая соотношение

$$J_\lambda(kr) = \frac{1}{2} [H_\lambda^{(1)}(kr) + H_\lambda^{(2)}(kr)],$$

перепишем формулу (9.70) в виде

$$\varphi_l(kr) \approx \frac{H_\lambda^{(1)}(kr)}{2} \left[1 - i\frac{\pi}{2} \int_0^\infty H_\lambda^{(2)}(kr)u(r)\varphi_l(kr)r dr \right] + \frac{H_\lambda^{(2)}(kr)}{2} \left[1 + i\frac{\pi}{2} \int_0^\infty H_\lambda^{(1)}(kr)u(r)\varphi_l(kr)r dr \right]. \quad (9.75)$$

При $k = +i\alpha$ ($\alpha > 0$) функция $H^{(1)}$ экспоненциально убывает, а $H^{(2)}$ экспоненциально растет. Требуя обращения в нуль коэффициента при экспоненциально растущей функции, приходим к условию

$$1 + i\frac{\pi}{2} \int_0^\infty H_\lambda^{(1)}(kr)u(r)\varphi_l(kr)r dr = 0. \quad (9.76)$$

Из сравнения (9.76) с (9.73) видно, что в точке $k = +i\alpha$ функция $S_l(k)$ имеет полюс. В точке $k = -i\alpha$ функция $S_l(k)$ имеет нуль, что доказывается аналогично.

Итак, связанному состоянию с энергией $-\alpha^2$ соответствует нуль матрицы рассеяния $S_l(k)$ на нижней мнимой полуоси и полюс на верхней мнимой полуоси (рис. 35). Обратное справедливо не всегда.

14. Значения волнового числа k , соответствующие рассеянию, лежат на действительной оси. Поэтому наличие полюса $S_l(k)$ будет заметно влиять на парциальную амплитуду, лишь если полюс близок к действительной оси. Соответствующие связанным состояниям полюсы будут поэтому проявляться главным образом в рассеянии медленных частиц ($\tau \lesssim 1$), когда основную роль играет s -рассеяние. В окрестности полюса

$$S_0 \approx \frac{\alpha - ik}{\alpha + ik}$$

и сечение рассеяния имеет вид

$$\sigma_0 = \frac{\pi}{k^2} |1 - S_0(k)|^2 = \frac{4\pi}{\alpha^2 + k^2}. \quad (9.77)$$

Вводя энергию связи $\epsilon = -\hbar^2 \alpha^2 (2m)^{-1}$, получим формулу Вигнера

$$\sigma_0 = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \frac{1}{E + |\epsilon|}. \quad (9.78)$$

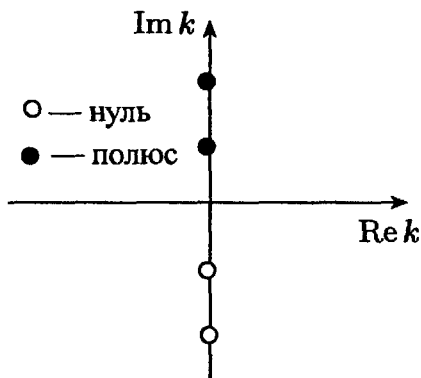


Рис. 35

Таким образом, если в потенциале $u(r)$ существует связанное состояние с энергией связи, малой по сравнению с u_0 , то сечение рассеяния медленных частиц сильно зависит от энергии. В борновском приближении сечение рассеяния медленных частиц равно

$$\sigma_B \approx B^2 a^2.$$

Формула Вигнера дает при $k \rightarrow 0$ значение

$$\sigma_W \approx \frac{4\pi U_0}{B |\epsilon|} a^2. \quad (9.79)$$

Из этого выражения видно, что при типичных для межнуклонных взаимодействий значениях $B \sim 1$ вигнеровское сечение значительно больше борновского.

Заметим, что в формуле (9.77) знак ϵ не играет роли. Поэтому к возрастанию сечения рассеяния медленных частиц приведет как полюс $S_0(k)$ на положительной мнимой полуоси, соответствующий связанному состоянию, так и полюс на отрицательной мнимой полуоси. Состояния, которым соответствуют такие полюсы, называются *виртуальными*. Из (9.75) следует, что ВФ виртуального состояния экспоненциально растет при больших r .

Из (9.75) следует также, что полюсу виртуального состояния на отрицательной мнимой полуоси соответствует симметричный нуль на положительной мнимой полуоси. В потенциале притяжения $-\gamma u(r) < 0$ с уменьшением γ полюсы на мнимой оси, соответствующие связанным состояниям, приближаются к действительной оси, а полюсы виртуальных состояний удаляются от нее, как показано на рис. 36.

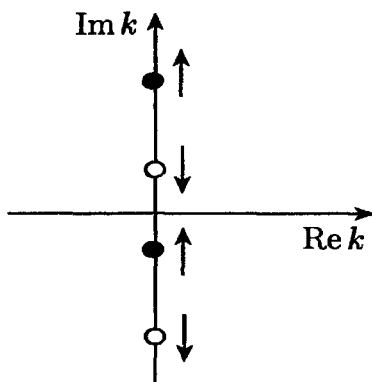


Рис. 36

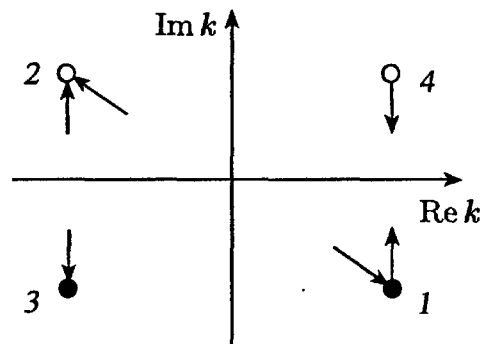


Рис. 37

Формула (9.78) хорошо описывает зависимость сечения от энергии при рассеянии нейтронов на протонах в триплетном состоянии (связанное состояние с энергией $\epsilon = -2,23$ МэВ) и в синглетном состоянии (виртуальное состояние с энергией $\epsilon = +0,06$ МэВ).

15. Матрица рассеяния может иметь особенности и вне мнимой оси. Их расположение подчинено определенным требованиям симметрии. Пусть $S_l(k)$ имеет полюс в точке $k = q + i\alpha$. Тогда из формулы

$$J_\lambda(z e^{i\pi}) = e^{i\pi\lambda} J_\lambda(z)$$

следует равенство

$$S_l(k) = S_l^{-1}(-k). \quad (9.80)$$

Таким образом, полюсу в точке 1 (рис. 37) соответствует нуль в точке 2, симметричной относительно начала координат. Далее, из соотношений

$$J_\lambda(z^*) = [J_\lambda(z)]^*, \\ H_\lambda^{(1)}(z^*) = [H_\lambda^{(2)}(z)]^*, \quad H_\lambda^{(2)}(z^*) = [H_\lambda^{(1)}(z)]^*$$

следует равенство

$$S_l^*(k^*) = S_l^{-1}(k). \quad (9.81)$$

Поэтому $S_l(k)$ будет иметь полюс в точке 3, симметричной точке 1 относительно действительной оси, и нуль в точке 4.

В верхней полуплоскости $S_l(k)$ имеет полюсы только на мнимой оси. В самом деле, полюсу в точке $k_0 = q + i\alpha$ соответствовало бы регулярное в нуле решение с экспоненциально убывающей асимптотикой. Поэтому $\varphi_l(k_0 r)$ было бы квадратично интегрируемым решением УШ, соответствующим СЗ $E = (q^2 - \alpha^2) + 2iq\alpha$, что несовместимо с требованием эрмитовости гамильтониана. Состояния, которым соответствуют пары полюсов в нижней полуплоскости комплексного k , называются *квазистационарными состояниями*. В окрестности такого полюса $S_l(k)$ имеет вид

$$S_l(k) \approx e^{2i\Delta} \frac{k - q + i\alpha}{k - q - i\alpha}.$$

Сечение рассеяния равно

$$\sigma = \frac{\pi}{k^2} |S - 1|^2 = \frac{2\pi}{k^2} \left[1 - \frac{g^2 - \alpha^2}{g^2 + \alpha^2} \cos 2\Delta + \frac{2\alpha g}{g^2 + \alpha^2} \sin 2\Delta \right]; \quad (9.82)$$

здесь введено обозначение $g = k - q$. При $g = 0$

$$\sigma \approx \frac{2\pi}{k^2} (1 + \cos 2\Delta),$$

и при небольших фазах Δ это сечение близко к максимально возможному. При $\alpha \ll q$ зависимость сечения от волнового числа k имеет явно выраженный резонансный характер. Формулу (9.82) при $k \sim q$,

$q \gg \varkappa$ принято записывать в виде

$$\sigma \approx \frac{\pi}{k^2} \left\{ \frac{\Gamma^2}{(E - E_0)^2 + \Gamma^2/4} - 4 \operatorname{Re} \left[e^{i\Delta} \sin \Delta \frac{\Gamma}{(E - E_0) + i\Gamma/2} \right] + 4 \sin^2 \Delta \right\}, \quad (9.83)$$

где величина $E_0 = \hbar^2(2m)^{-1}(q^2 - \varkappa^2)$ называется *резонансной энергией*, а величина $\Gamma = \hbar^2 m^{-1} q \varkappa$ называется *шириной резонанса*. Первый член в фигурной скобке (9.83) соответствует резонансному рассеянию на квазистационарном уровне, третий член дает сечение потенциального рассеяния, а второй описывает интерференцию между потенциальным и резонансным рассеяниями.

16. Все результаты, полученные с помощью рассмотрения рассеяния парциальных волн, предполагают конечность фаз δ_l и относятся к потенциалам $u(r)$, убывающим при $r \rightarrow \infty$ не медленнее, чем r^{-2} . Кулоновский потенциал, представляющий особый интерес, этому требованию не удовлетворяет. Однако для рассеяния частиц, взаимодействующих только по закону Кулона, можно получить точное выражение для ВФ рассеяния.

Задача рассеяния обладает аксиальной симметрией. Поэтому удобно использовать, как и в п. 8.1, параболические координаты, допускающие разделение переменных в УШ

$$\psi = f(\xi)g(\eta).$$

Уравнения имеют вид (в кулоновских единицах)

$$\frac{d}{d\xi} \left(\xi \frac{df}{d\xi} \right) + \left(\frac{k^2}{4} \xi - \beta_1 \right) f = 0, \quad (9.84)$$

$$\frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{dg}{d\eta} \right) + \left(\frac{k^2}{4} \eta - \beta_2 \right) g = 0, \quad (9.85)$$

где параметры разделения β_1, β_2 удовлетворяют условию $\beta_1 + \beta_2 = 1$. Граничное условие

$$\psi \sim \exp(ikz) = \exp\left(i\frac{k}{2}(\xi - \eta)\right) \quad (z = (\xi - \eta) \rightarrow -\infty) \quad (9.86)$$

можно выполнить при всех ξ , положив

$$f(\xi) = \exp\left(i\frac{k}{2}\xi\right)$$

(подстановка в (9.84) дает $\beta_1 = ik/2$). Тогда из (9.86) следует граничное условие для $g(\eta)$:

$$g(\eta) \sim \exp\left(-i\frac{k}{2}\eta\right) \quad (\eta \rightarrow \infty).$$

Уравнение (9.85) переходит в

$$\frac{d}{d\eta} \left(\eta \frac{dg}{d\eta} \right) + \left(\frac{k^2}{4} \eta - 1 + \frac{ik}{2} \right) g = 0. \quad (9.87)$$

Ищем решение в виде

$$g(\eta) = \exp \left(-\frac{ik}{2} \eta \right) w(\eta).$$

(ср. (5.23)). Тогда (9.87) дает

$$\eta w'' + (1 - ik\eta)w' - w = 0.$$

Полагая $x = ik\eta$, получим

$$w = \text{const } F \left(-\frac{i}{k}, 1; x \right),$$

где $F(\alpha, \gamma; x)$ — вырожденная гипергеометрическая функция. При больших x справедливо асимптотическое представление для вырожденной гипергеометрической функции

$$\begin{aligned} F(\alpha, \gamma; x) &= \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} x^{\alpha-\gamma} e^x \times \\ &\times \left[1 + \frac{(\alpha-1)(\alpha-\gamma)}{x} + \frac{(\alpha-1)(\alpha-2)(\alpha-\gamma)(\alpha-\gamma-1)}{2!x^2} + \dots \right] + \\ &+ \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha-\gamma)} x^{-\alpha} e^{i\alpha\pi} \times \\ &\times \left[1 + \frac{\alpha(\gamma-\alpha-1)}{x} + \frac{\alpha(\alpha+1)(\gamma-\alpha-1)(\gamma-\alpha-2)}{2!x^2} + \dots \right]. \end{aligned}$$

Здесь $\Gamma(z)$ есть гамма-функция Эйлера. Сохраняя члены до η^{-1} включительно (члены высших порядков не дадут в пределе $r \rightarrow \infty$ вклада в ток j_r), получим

$$\begin{aligned} F(\alpha, \gamma; ik\eta) &= \frac{\exp(\pi/2k) + (i/k) \ln k\eta}{\Gamma(1+i/k)} \left(1 + \frac{1}{ik^2\eta} \right) - \\ &- \frac{\exp(\pi/2k) - (i/k) \ln k\eta + ik\eta}{\Gamma(1-i/k)k^2\eta}. \end{aligned}$$

Перейдем к сферическим координатам

$$\eta = r(1 - \cos \theta), \quad \xi = r(1 + \cos \theta).$$

Тогда ВФ задачи рассеяния примет вид

$$\begin{aligned} \psi(r, \theta) = & A \frac{\exp(\pi/2k)}{\Gamma(1+i/k)} \times \\ & \times \left[1 + \frac{1}{ik^3 r(1-\cos\theta)} \right] \exp \left[ikr + \frac{i}{k} \ln kr(1-\cos\theta) \right] + \\ & + A \frac{\exp(\pi/2k)}{\Gamma(1-i/k)} \frac{\exp [ikr - (i/k) \ln kr(1-\cos\theta)]}{k^2 r(1-\cos\theta)}. \end{aligned} \quad (9.88)$$

Нормировочную постоянную A определим, потребовав, чтобы коэффициент при падающей плоской волне был равен единице. Тогда

$$A = \exp\left(-\frac{\pi}{2k}\right) \Gamma\left(1 + \frac{i}{k}\right). \quad (9.89)$$

Используя (9.88), (9.89) и определение амплитуды рассеяния, получим

$$f(\theta) = -\frac{1}{2k^2 \sin^2(\theta/2)} \exp\left(-\frac{2i}{k} \ln \sin \frac{\theta}{2}\right) \cdot \frac{\Gamma(1+i/k)}{\Gamma(1-i/k)}. \quad (9.90)$$

Выражение для дифференциального сечения рассеяния в обычных переменных имеет вид

$$d\sigma = \left(\frac{\alpha m}{2p^2}\right)^2 \sin^{-4} \frac{\theta}{2} d\Omega. \quad (9.91)$$

Выбранные в уравнениях (9.84), (9.85) знаки соответствуют потенциалу отталкивания. В случае притяжения величина (9.90) заменяется комплексно-сопряженной, а выражение для сечения (9.91) остается неизменным. Наличие члена $\sim r^{-1}$ в амплитуде падающей волны и логарифмических членов в фазах связано с медленным убыванием кулоновского поля. Однако эти члены в пределе $r \rightarrow \infty$ не дают вклада в радиальную компоненту потока вероятности.

17. Выражение (9.91) для дифференциального сечения рассеяния в кулоновском поле совпадает с *формулой Резерфорда*, полученной из классической механики. Это уникальное совпадение в значительной степени ускорило возникновение квантовой механики. Ни в старой квантовой теории Бора, ни в матричном расчете Паули, ни в работе Шредингера при вычислении спектра атома водорода не подвергалось сомнению, что потенциал взаимодействия электрона и протона является чисто кулоновским. Однако основным доводом в пользу кулоновского потенциала являлось прекрасное согласие данных по рассеянию α -частиц на ядрах с результатом классического расчета. Другие потенциалы, в которых классический и квантовый подходы приводили бы к одинаковым выражениям для дифференциальных сечений, не известны.

Всюду в этой главе мы предполагали потенциал $U(r)$ известным. На практике имеет место противоположная ситуация. За исключением случаев рассеяния электронов на заряженных частицах и на атомах, когда основную роль играет электростатическое взаимодействие, потенциал $U(r)$ не известен. Возникает задача об определении потенциала по данным рассеяния — обратная задача теории рассеяния.

В общем случае для однозначного определения $U(r)$ необходимо знать функцию $\delta_l(E)$ — сдвиг фаз для всех энергий для одного фиксированного значения l . Знание этой функции достаточно для определения потенциала отталкивания или потенциала притяжения, не имеющего при данном l связанных состояний. Для потенциалов со связанными состояниями этого недостаточно: известны примеры потенциалов с одинаковыми функциями $\delta_0(E)$, но с различными дискретными спектрами. Для восстановления таких потенциалов достаточно, кроме $\delta_l(E)$, знать энергии связи E_{nl} состояний дискретного спектра и коэффициенты a_{nl} , входящие в асимптотическое выражение для ВФ связанных состояний:

$$R_{nl}(r) \approx a_{nl} r^{-1} e^{-\kappa_{nl} r},$$

$$\kappa_{nl}^2 = 2mE_{nl}\hbar^{-2}.$$

Коэффициенты a_{nl} связаны с вычетами в полюсах S -матрицы. Задача определения $U(r)$ по этим данным сводится к решению некоторого линейного интегрального уравнения.

ЗАДАЧИ

1. Определить асимптотическую зависимость $\sigma(k)$ при $k \rightarrow \infty$ в борновском приближении.

2. Вычислить в борновском приближении $d\sigma$ и σ в потенциале Юкавы

$$U(r) = -U_0 \frac{a}{r} e^{-r/a}.$$

3. Вычислить в борновском приближении $d\sigma$ и σ в потенциале

$$U(r) = U_0 e^{-r/a}.$$

4. Используя разложение (9.20), найти выражение для амплитуды рассеяния во втором борновском приближении.

5. Определить σ для рассеяния частиц высокой энергии сферической потенциальной ямой, считая, что в приближении Мольера выполняется оптическая теорема.

6. Используя приближение Мольера, найти поправку к борновскому приближению для частиц высокой энергии.

7. Показать, исходя из формулы (9.31), что для рассеяния нуклонов высокой энергии на дейтроне амплитуда рассеяния имеет вид

$$F(\mathbf{q}) = f_n(\mathbf{q})S\left(\frac{1}{2}\mathbf{q}\right) + f_p(\mathbf{q})S\left(\frac{1}{2}\mathbf{q}\right) +$$

$$+ \frac{i}{2\pi k} \int S(\mathbf{q}') f_n\left(\frac{1}{2}\mathbf{q} + \mathbf{q}'\right) f_p\left(\frac{1}{2}\mathbf{q} - \mathbf{q}'\right) d\mathbf{q}',$$

где f_n и f_p — независимые от спинов амплитуды рассеяния на нейтроне и протоне, а формфактор $S(\mathbf{q})$ определяется формулой

$$S(\mathbf{q}) = \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} |\varphi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r},$$

где φ есть ВФ основного состояния.

8. Вывести оптическую теорему из формулы Факсена–Хольтсмарка.

9. Найти выражения для фазовых сдвигов $\delta_l(k)$ в борновском приближении.

10. Найти в борновском приближении фазовые сдвиги в потенциале

$$U(r) = U_0 e^{-(r/a)^2}.$$

11. Найти в борновском приближении фазовые сдвиги в потенциале

$$U(r) = U_0 \frac{a^2}{r^2 + a^2}.$$

12. Найти в борновском приближении фазовые сдвиги в потенциале

$$U(r) = -Ar^{-3}.$$

13. Найти эффективный радиус сферического потенциала (9.60).

14. Доказать, что при вещественных k фаза рассеяния $\delta_l(k)$ есть нечетная функция k .

15. Показать, что в приближении Вигнера выполняется оптическая теорема.

16. Найти матричный элемент $S_0(k)$ для рассеяния в потенциале

$$U(r) = -U_0 e^{-r/a}.$$

Исследовать особые точки $S_0(k)$.

17. Найти в первом борновском приближении $S_0(k)$ для рассеяния в потенциале Юкавы

$$U(r) = -U_0 \frac{a}{r} e^{-r/a}.$$

Исследовать особые точки.

18. Показать, что в кулоновском потенциале притяжения связанным состояниям соответствуют полюсы полной амплитуды p -рассеяния на положительной мнимой полуоси. Отметим, что кулоновский потенциал не удовлетворяет условиям конечности фазовых сдвигов, а потому теория, изложенная в пп. 9.11–9.15, для него неприменима.

19. Вычислить в борновском приближении $d\sigma$ в кулоновском потенциале $U = -\alpha r^{-1}$. Рассмотреть предельный переход $a \rightarrow \infty$, $U_0 a = \alpha$ в результате задачи 9.2.

20. Объяснить, почему при $k \rightarrow 0$ рассеяние в кулоновском поле не становится изотропным.

РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ПОПРАВКИ

0. Всюду в книге мы ограничиваемся описанием явлений, происходящих в нерелятивистской области: при энергиях частиц, малых по сравнению с их энергией покоя. Но даже в этом случае возникает необходимость в рассмотрении релятивистских волновых уравнений. Причин для этого две.

Во-первых, релятивистские поправки к атомным уровням энергии хотя и малы по сравнению с самими значениями уровней, но все же являются существенными. Относительную величину поправок для спектра водородоподобных ионов можно оценить отношением энергии связи E_{nl} к энергии покоя электрона:

$$\frac{|E_{nl}|}{mc^2} \approx \frac{Z^2 me^4}{\hbar^2} \frac{1}{mc^2} \approx \frac{\delta E^{(r)}}{|E_{nl}|} \approx Z^2 \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right)^2.$$

Даже для атома водорода ($Z = 1$) $\delta E^{(r)} \sim 10^{-4} E_n$ и значительно превышает экспериментальные ошибки в определении разности энергий. Для ядер с большими зарядами поправка еще значительней.

Во-вторых, спиновый момент частиц, свойства которого рассматривались в гл. 4, в нерелятивистском приближении входит в теорию лишь кинематически. В частности, в главах 5 и 8 мы вообще не рассматривали зависимость ВФ от спиновых переменных. Это оправдано лишь при рассмотрении движения одной частицы в электрическом поле. Зависимость энергетических уровней одной частицы от спиновых переменных есть релятивистский эффект, который может проявляться и в нерелятивистской области.

В этой главе мы рассмотрим следующие из релятивистских волновых уравнений поправки к уравнению Шредингера, оставляя в стороне вопросы последовательной релятивистской теории.

1. В нерелятивистской квантовой механике движение системы описывается уравнением первого порядка по времени. То же должно иметь место и в релятивистской теории: задание состояния системы в некоторый момент времени должно определять ее дальнейшую эволюцию. Поэтому уравнение должно иметь вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi.$$

Релятивистское волновое уравнение должно быть одного порядка по временной и пространственным производным. Поэтому наиболее общий вид релятивистского гамильтониана для свободной частицы

есть

$$\hat{H} = c(\alpha\hat{p}) + mc^2\beta, \quad (10.1)$$

где \hat{p} — обычный оператор импульса. Коэффициенты введены в это определение так, чтобы α и β были безразмерными. Из требования эрмитовости гамильтониана имеем

$$\alpha = \alpha^+, \quad \beta = \beta^+.$$

Потребуем, чтобы для свободного движения частицы с импульсом p выполнялось обычное соотношение релятивистской механики

$$\epsilon^2 = c^2p^2 + m^2c^4,$$

где ϵ означает релятивистскую энергию частицы, включающую энергию покоя. Тогда имеет место равенство

$$\begin{aligned} \hat{H}^2 &= m^2c^4\beta^2 + mc^3(\beta\alpha + \alpha\beta)p + \frac{1}{2}c(\alpha_i\alpha_k + \alpha_k\alpha_i)p_i p_k = \\ &= m^2c^4 + c^2p^2. \end{aligned}$$

Таким образом, величины α и β должны удовлетворять условиям

$$\beta^2 = 1, \quad (10.2)$$

$$\beta\alpha + \alpha\beta = 0, \quad (10.3)$$

$$\alpha_i\alpha_k + \alpha_k\alpha_i = 2\delta_{ik}. \quad (10.4)$$

Очевидно, эти требования можно выполнить, если считать α_i и β матрицами, но если их считать обычными числами, то эти требования выполнить нельзя.

2. Рассмотрим свойства матриц α_i ($i = 1, 2, 3$) и β . Из условий (10.2) и (10.4) следует, что

$$\alpha_i^{-1} = \alpha_i, \quad \beta^{-1} = \beta.$$

Из (10.3) получаем

$$\alpha_i^{-1}\beta\alpha_i = -\beta, \quad \text{Sp}(\alpha_i^{-1}\beta\alpha_i) = \text{Sp}\beta = -\text{Sp}\beta = 0.$$

Матрица β может быть приведена к диагональному виду. Из условий

$$\text{Sp}\beta = 0, \quad \beta^2 = 1$$

следует, что в этом случае на главной диагонали матрицы β стоят в равных количествах числа $+1$ и -1 . Таким образом, α_i и β суть матрицы четного порядка. Перенумеруем компоненты так, чтобы матрица β имела вид

$$\beta = \begin{vmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{vmatrix}, \quad (10.5)$$

где I — единичная субматрица. Рассмотрим условие (10.3). Представим матрицу α_i разбитой на субматрицы того же порядка, что и β в формуле (10.5). Тогда

$$\alpha_i \beta + \beta \alpha_i = 2 \begin{vmatrix} p_i & 0 \\ 0 & -s_i \end{vmatrix} = 0. \quad (10.6)$$

Следовательно, $p_i = s_i = 0$. Из условия эрмитовости матрицы α_i следует

$$\alpha_i = \begin{vmatrix} 0 & q_i \\ r_i & 0 \end{vmatrix} = \alpha_i^+ = \begin{vmatrix} 0 & r_i^+ \\ q_i^+ & 0 \end{vmatrix}, \quad (10.7)$$

$$q_i = r_i^+, \quad r_i = q_i^+.$$

Используя эти соотношения вместе с равенством (10.4), придем к формуле

$$q_i q_k^+ + q_k q_i^+ = 2\delta_{ik}. \quad (10.8)$$

Пусть $i \neq k$. Тогда, перенося второй член в каждой из формул (10.8) в правую часть и перемножая все три равенства, получим

$$q_1 q_2^+ q_2 q_3^+ q_3 q_1^+ = -q_2 q_1^+ q_3 q_2^+ q_1 q_3^+.$$

По теореме о произведении определителей

$$\begin{aligned} \text{Det} (q_1 q_2^+ q_2 q_3^+ q_3 q_1^+) &= \text{Det} (q_1 q_2 q_3 q_1^+ q_2^+ q_3^+) = \\ &= \text{Det} (-q_2 q_1^+ q_3 q_2^+ q_1 q_3^+) = (-1)^N \text{Det} (q_1 q_2 q_3 q_1^+ q_2^+ q_3^+), \end{aligned}$$

где N — размерность матриц q_i . Таким образом, N должно быть четным числом. При $i = k$ из (10.8) следует, что субматрица q_i должна быть унитарна. Итак, условиям (10.2), (10.3), (10.4) могут удовлетворить только матрицы размерности $4K$. Пусть $K = 1$. Уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = [c(\alpha \hat{p}) + mc^2 \beta] \psi \quad (10.9)$$

для четырехкомпонентной функции ψ , где α_i и β — матрицы четвертого порядка, называется *уравнением Дирака*.

Субматрицы второго порядка, удовлетворяющие соотношениям (10.8), нам уже известны (см. гл. 4): это матрицы Паули

$$\sigma_1 = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}.$$

Итак, в представлении, в котором β имеет вид (10.5),

$$\alpha_i = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{vmatrix}. \quad (10.10)$$

Такое представление мы будем называть *стандартным*.

3. Умножим уравнение Дирака (10.9) на β/c . Тогда его можно записать в виде

$$\left[i\hbar\beta \frac{\partial \psi}{\partial ct} - \beta\alpha\hat{p} - mc \right] \psi = 0. \quad (10.11)$$

Найдем унитарный оператор, осуществляющий преобразование поворота системы координат. Выберем представление, в котором в новой системе координат волновая функция ψ , как функция независимых переменных, имеет тот же вид, что и в старой (см. п. 4.10). Поскольку при пространственном повороте \mathbf{p} преобразуется, как вектор, то для того чтобы уравнение (10.11) обладало правильными трансформационными свойствами, величина $\beta\alpha$ также должна преобразовываться, как вектор. Оператор, осуществляющий преобразование \mathbf{p} , известен. При повороте вокруг оси z он имеет вид

$$\hat{\mathbf{p}}' = \hat{U}^+ \hat{\mathbf{p}} \hat{U}, \quad \hat{U} = e^{i\hat{l}_z \varphi}. \quad (10.12)$$

Здесь \hat{l}_z — оператор орбитального момента. Он действует на функции пространственных переменных. Матрицы α_i и β от пространственных переменных не зависят, а поэтому преобразовываться оператором \hat{U} не будут. Из требования инвариантности уравнения (10.11) следуют соотношения

$$\begin{aligned} e^{i\hat{L}\varphi} \beta \alpha_1 e^{-i\hat{L}\varphi} &= \beta \alpha_1 \cos \varphi + \beta \alpha_2 \sin \varphi, \\ e^{i\hat{L}\varphi} \beta \alpha_2 e^{-i\hat{L}\varphi} &= -\beta \alpha_1 \sin \varphi + \beta \alpha_2 \cos \varphi, \\ e^{i\hat{L}\varphi} \beta \alpha_3 e^{-i\hat{L}\varphi} &= \beta \alpha_3. \end{aligned}$$

Используя явный вид матриц

$$\beta \alpha_1 = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_1 \\ -\sigma_1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \beta \alpha_2 = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_2 \\ -\sigma_2 & 0 \end{vmatrix}, \quad \beta \alpha_3 = \begin{vmatrix} 0 & \sigma_3 \\ -\sigma_3 & 0 \end{vmatrix},$$

найдем вид оператора \hat{L} :

$$\hat{L} = -\frac{1}{2} \hat{\Sigma}_z, \quad \hat{\Sigma}_z = \begin{vmatrix} \sigma_3 & 0 \\ 0 & \sigma_3 \end{vmatrix}.$$

Очевидно, операторы \hat{l}_z и $\hat{\Sigma}_z$ действуют в разных пространствах, а поэтому коммутируют. Поэтому унитарный оператор, осуществляющий преобразование поворота системы координат вокруг произвольной оси φ , можно представить в виде

$$\hat{V} = \exp \left[-i \left(\hat{\mathbf{1}} + \frac{1}{2} \hat{\Sigma} \right) \varphi \right].$$

Непосредственным вычислением можно убедиться, что оператор $\hat{\Sigma}$ коммутирует с β . Поэтому

$$\hat{V}^+ (\beta \hat{H}) \hat{V} = \beta \hat{H} = \beta (\hat{V}^+ \hat{H} \hat{V}).$$

Следовательно, в случае свободного движения величина $\hat{\mathbf{I}} + \hat{\Sigma}/2$ является интегралом движения. Оператор

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{s}} = \hat{\mathbf{I}} + \frac{1}{2}\hat{\Sigma} \quad (10.13)$$

есть оператор полного момента частицы, $\hat{\mathbf{s}} = \hat{\Sigma}/2$ — оператор спина. Рассмотрим проекцию спинового момента на направление импульса свободной частицы

$$\frac{\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{p}}}{p} = \frac{1}{2p} \begin{vmatrix} \hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}} & 0 \\ 0 & \hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}} \end{vmatrix} = \hat{h}.$$

Гамильтониан уравнения Дирака, выраженный через субматрицы, имеет вид

$$\hat{H} = c \begin{vmatrix} 0 & \hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}} \\ \hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}} & 0 \end{vmatrix} + mc^2 \begin{vmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{vmatrix}.$$

Используя формулу

$$(\hat{\sigma}\mathbf{A})(\hat{\sigma}\mathbf{B}) = \mathbf{A}\mathbf{B} + i\hat{\sigma}[\mathbf{A} \times \mathbf{B}], \quad (10.14)$$

непосредственным вычислением легко убедиться, что оператор \hat{h} коммутирует с гамильтонианом. Для свободной частицы величина проекции спина на направление импульса, называемая *спиральностью*, сохраняется. Из явного вида матрицы Σ ясно, что проекция спина может принимать лишь значения $\pm 1/2$ (в единицах \hbar). Таким образом, уравнение Дирака описывает частицы со спином $1/2$. Замечательно, что для установления этого не требуются никакие дополнительные предположения, кроме выдвинутых в п. 10.1.

4. Найдем стационарное решение уравнения Дирака для свободной частицы в состоянии с заданными значениями компонент импульса. Полагая

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-i\epsilon t/\hbar},$$

получим

$$\epsilon\psi(\mathbf{r}) = \hat{H}\psi(\mathbf{r}).$$

Выразим четырехкомпонентную функцию ψ через две двухкомпонентные функции

$$\varphi = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix}, \quad \chi = \begin{vmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{vmatrix}.$$

Используя стандартное представление матриц α_i , β , получим систему

$$\begin{aligned} \epsilon\varphi &= c\hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}}\chi + mc^2\varphi, \\ \epsilon\chi &= c\hat{\sigma}\hat{\mathbf{p}}\varphi - mc^2\chi. \end{aligned}$$

Волновые функции состояния с определенным импульсом удовлетворяют уравнениям

$$\begin{aligned} (mc^2 - \epsilon) \varphi + c \sigma \mathbf{p} \chi &= 0, \\ c \sigma \mathbf{p} \varphi - (mc^2 + \epsilon) \chi &= 0. \end{aligned} \quad (10.15)$$

Условие совместности этой системы линейных уравнений состоит в равенстве нулю ее определителя. Учитывая операторное тождество (10.14), получаем

$$\begin{aligned} m^2 c^4 - \epsilon^2 + c^2 p^2 &= 0, \\ \epsilon &= \lambda \sqrt{c^2 p^2 + m^2 c^4}, \quad \lambda = \pm 1. \end{aligned}$$

Двум знакам в этом выражении соответствуют два типа решений уравнения Дирака. Таким образом, задания компонент оператора импульса в общем случае недостаточно для описания движения свободной релятивистской частицы: нужно указать еще значение параметра λ . Решения с $\lambda = +1$ будем называть положительными.

Одна из двухкомпонентных функций может быть выражена через другую:

$$\chi = \frac{c \sigma \mathbf{p}}{mc^2 + \epsilon} \varphi. \quad (10.16)$$

Таким образом, из четырех компонент функции ψ , соответствующей заданному \mathbf{p} , только две могут быть заданы независимо, остальные две определяются при выбранном λ из формулы (10.16). Пусть

$$\varphi = \begin{vmatrix} a_1 \\ a_2 \end{vmatrix} \exp\left(i \frac{\mathbf{p} \mathbf{r}}{\hbar}\right) = \mathbf{a} \exp\left(i \frac{\mathbf{p} \mathbf{r}}{\hbar}\right),$$

где \mathbf{a} — спиновая функция, не зависящая от координат. Тогда

$$\psi(\mathbf{r}) = \begin{vmatrix} \mathbf{a} \\ \frac{c}{mc^2 + \epsilon} \sigma \mathbf{p} \mathbf{a} \end{vmatrix} \cdot \exp\left(i \frac{\mathbf{p} \mathbf{r}}{\hbar}\right).$$

В системе отсчета, где движение частицы является нерелятивистским, $\epsilon = \lambda(mc^2 + E)$, где $E \ll mc^2$. Поэтому для положительных решений (при $\epsilon > 0$)

$$\chi = \frac{c \sigma \mathbf{p}}{mc^2 + \epsilon} \varphi \approx \frac{p}{2mc} \varphi \ll \varphi,$$

а для отрицательных (при $\epsilon < 0$)

$$\chi = \frac{c \sigma \mathbf{p}}{mc^2 - \epsilon} \varphi \approx -\frac{2mc}{p} \varphi \gg \varphi.$$

Таким образом, в нерелятивистском предельном случае две из четырех компонент ψ оказываются малыми по сравнению с двумя другими.

5. Уравнение Дирака часто бывает удобно представить в другой, более симметричной форме. Положим $x^\mu = (ct, \mathbf{r})$ ($\mu = 0, 1, 2, 3$). Выберем метрический тензор в виде

$$g_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} (-1 + 2\delta_{\mu 0}).$$

Введем оператор 4-импульса

$$p^\mu = i\hbar \frac{\partial}{\partial x_\mu}.$$

Тогда уравнение (10.11) можно переписать в форме

$$(\gamma^\mu p_\mu - mc) \psi = 0, \quad (10.17)$$

где матрицы γ^μ определяются равенствами

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^k = \beta\alpha_k \quad (k = 1, 2, 3).$$

Матрицы γ^μ удовлетворяют соотношению

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}. \quad (10.18)$$

Индексы матриц γ^μ поднимаются и опускаются по правилу

$$\gamma^\mu = g^{\mu\nu} \gamma_\nu.$$

6. Рассмотрим уравнение Дирака для движения заряженной частицы со спином $1/2$ во внешнем электромагнитном поле, которое описывается 4-потенциалом $A_\mu = (\Phi, \mathbf{A})$. Классическая релятивистская функция Лагранжа имеет вид

$$\mathcal{L} = -mc^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \mathbf{v} - e\Phi.$$

Компоненты обобщенного импульса соответственно равны

$$P_0 = p_0^f + e\Phi, \quad \mathbf{P} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{v}} = \mathbf{p}^f + \frac{e}{c} \mathbf{A},$$

где p_μ^f — компоненты 4-импульса свободной частицы. Обобщив правило гл. 2 на релятивистский случай, мы заменим в уравнении Дирака оператор p_μ на выражение для него, содержащее обобщенный импульс. Итак, уравнение Дирака для частицы во внешнем электромагнитном поле имеет вид

$$\left[\gamma^\mu \left(p_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) - mc \right] \psi = 0. \quad (10.19)$$

Рассмотрим уравнение Дирака в электромагнитном поле в нерелятивистском случае. Четырехкомпонентную функцию ψ удобно выразить через двухкомпонентные ϕ и χ :

$$\begin{aligned} (\varepsilon - e\Phi - mc^2) \phi &= c \boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \chi, \\ (\varepsilon - e\Phi + mc^2) \chi &= c \boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \phi. \end{aligned}$$

Ограничимся случаем слабого поля

$$\varepsilon - e\Phi - mc^2 \ll mc^2.$$

Выбирая положительное решение и полагая $E = \varepsilon - mc^2$, получим

$$\begin{aligned} E\varphi &= c\boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \chi + e\Phi\varphi, \\ \chi &= \frac{c\boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)}{E + 2mc^2 - e\Phi} \varphi \approx \frac{1}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \varphi. \end{aligned} \quad (10.20)$$

Исключая функцию χ , находим

$$E\varphi = \left\{ \frac{1}{2m} \left[\boldsymbol{\sigma} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \right]^2 + e\Phi \right\} \varphi.$$

Используя тождество (10.14), приходим к равенству

$$E\varphi = \left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + e\Phi - \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \operatorname{rot} \mathbf{A} \right] \varphi.$$

Введем напряженность магнитного поля

$$\mathbf{H} = \operatorname{rot} \mathbf{A}.$$

Тогда

$$E\varphi = \left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + e\Phi - \frac{e\hbar}{2mc} (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H}) \right] \varphi. \quad (10.21)$$

Это уравнение для большой в нерелятивистском пределе двухкомпонентной функции φ называется *уравнением Паули*. Соответствующее уравнение для $\varphi(t)$ имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left[\frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + e\Phi - \frac{e\hbar}{2mc} (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H}) \right] \varphi. \quad (10.22)$$

Дополнительный член в гамильтониане (10.22) можно интерпретировать как энергию взаимодействия собственного магнитного дипольного момента частицы

$$\boldsymbol{\mu} = \mu_0 \boldsymbol{\sigma}, \quad \mu_0 = \frac{e\hbar}{2mc},$$

с магнитным полем. Величина μ_0 называется *магнетонном Бора*,

$$\mu_0 = 9,27 \cdot 10^{-21} \text{ эрг} \cdot \text{Гс}^{-1}.$$

Экспериментально наблюдаемый магнитный момент электрона действительно очень близок к значению μ_0 . Для нуклонов имеют место значительные отклонения.

7. При выводе уравнения Паули мы пренебрегли членами порядка $(mc^2)^{-1}(E - e\Phi)$. Поэтому полученное уравнение не содержит релятивистских поправок к гамильтониану заряда во внешнем электростатическом поле. Отыскание таких поправок представляет интерес для атомной спектроскопии. Пусть $A = 0$, $e\Phi = U(\mathbf{r})$. Тогда

$$\begin{aligned} [E - U(\mathbf{r})] \varphi &= c \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} \chi, \\ [2mc^2 + E - U(\mathbf{r})] \chi &= c \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} \varphi. \end{aligned}$$

Учтем члены следующего порядка в разложении (10.20):

$$\chi \approx \left[1 - \frac{E - U(\mathbf{r})}{2mc^2} \right] \frac{\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p}}{2mc} \varphi.$$

Тогда для функции φ получаем

$$[E - U(\mathbf{r})] \varphi = \frac{\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p}}{2m} \left[1 - \frac{E - U(\mathbf{r})}{2mc^2} \right] \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} \varphi. \quad (10.23)$$

С помощью коммутационного соотношения

$$[\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p}, f \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p}] = -i\hbar (\boldsymbol{\sigma} \text{grad } f) (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p})$$

и тождества (10.14), получаем равенство

$$\boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} \cdot f \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p} = f p^2 - i\hbar (\nabla f \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} [\nabla f \times \mathbf{p}]).$$

С учетом этого равенства уравнение (10.23) принимает вид

$$\begin{aligned} E\varphi &= \left[1 - \frac{E - U(\mathbf{r})}{2mc^2} \right] \frac{\hat{p}^2}{2m} \varphi + U\varphi + \\ &+ \frac{\hbar \boldsymbol{\sigma}}{4m^2 c^2} [(\nabla U) \times \mathbf{p}] \varphi - \frac{i\hbar}{4m^2 c^2} (\nabla U) \mathbf{p} \varphi. \end{aligned} \quad (10.24)$$

В первом члене в правой части с принятой точностью можно произвести замену

$$E - U(\mathbf{r}) \approx \frac{\hat{p}^2}{2m}.$$

Окончательный вид оператора \hat{H} :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_1 + \hat{V}_2 + \hat{V}_3,$$

где

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r})$$

есть обычный нерелятивистский гамильтониан частицы в заданном поле. Первый дополнительный член

$$\hat{V}_1 = -\frac{\hat{p}^4}{8m^3 c^2} \quad (10.25)$$

учитывает релятивистскую зависимость кинетической энергии от импульса. Второй дополнительный член

$$\hat{V}_2 = \frac{\hbar \boldsymbol{\sigma}}{4m^2 c^2} [(\nabla U) \times \mathbf{p}] \varphi \quad (10.26)$$

описывает энергию *спин-орбитального взаимодействия*. Он может быть интерпретирован как энергия взаимодействия движущегося магнитного момента с электрическим полем. В центральном поле

$$\nabla U = \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{dU(r)}{dr},$$

и оператор \hat{V}_2 может быть преобразован к виду

$$\hat{V}_2 = \frac{\hbar\sigma}{4m^2c^2} [\mathbf{r} \times \mathbf{p}] \frac{1}{r} \frac{dU}{dr} = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2r} \frac{dU}{dr} \hat{\mathbf{l}} \hat{\mathbf{s}}. \quad (10.27)$$

Наконец, третий дополнительный член

$$\hat{V}_3 = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} (\nabla U) \nabla$$

не может быть сохранен в таком виде из-за своей неэрмитовости:

$$\hat{V}_3^+ = -\hat{V}_3 + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \nabla^2 U.$$

Заменяя его в соответствии с правилом п. 2.1 эрмитовой частью, получим

$$\hat{V}_3 = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \nabla^2 U. \quad (10.28)$$

Это выражение называется энергией *контактного взаимодействия* и не имеет наглядной интерпретации или классического аналога.

8. Рассмотрим влияние релятивистских поправок на положение энергетических уровней водородоподобных ионов. Поскольку в стационарных состояниях $p \sim \hbar a_0^{-1} \ll mc$, то релятивистские члены малы, и можно ограничиться их учетом в первом порядке теории возмущений. Введем атомные единицы. Тогда операторы \hat{V}_i , примут вид

$$\hat{V}_1 = -\frac{\alpha^2}{8} \hat{p}^4, \quad \hat{V}_2 = \frac{\alpha^2}{2} \hat{\mathbf{l}} \hat{\mathbf{s}} \frac{1}{r} \frac{dU}{dr},$$

$$\hat{V}_3 = \frac{\alpha^2}{8} \nabla^2 U.$$

Здесь введено обозначение α для безразмерной величины

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137,04},$$

которая называется *постоянной тонкой структуры*.

Вычисление поправок от операторов \hat{V}_1 и \hat{V}_3 облегчается тем, что они действуют только на радиальную часть ВФ. В кулоновском поле ядра $U = -Z/r$

$$\hat{V}_3 = \frac{\alpha^2 Z}{8} \cdot 4\pi\delta(\mathbf{r}), \quad E_3^{(1)} = \frac{\alpha^2 Z^4}{2n^3} \delta_{l0}. \quad (10.29)$$

Таким образом, контактная поправка отлична от нуля только для s -состояний. Поправка от члена \widehat{V}_1 вычисляется с помощью представления оператора \widehat{V}_1 в виде

$$\widehat{V}_1 = -\frac{\alpha^2}{2} \left(\frac{\widehat{p}^2}{2} \right)^2 = -\frac{\alpha^2}{2} \left(E + \frac{Z}{r} \right)^2. \quad (10.30)$$

Итак,

$$E_1^{(1)} = -\frac{\alpha^2}{2} \left(E_n^2 + 2ZE_n \overline{r^{-1}} + Z^2 \overline{r^{-2}} \right) = \frac{\alpha^2 Z^2}{2n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l+1/2} \right).$$

При вычислении использованы результаты задач 5.4 и 5.5.

В нерелятивистском приближении энергия электрона в водородо-подобном атоме не зависит от спина. Поэтому для вычисления спин-орбитальной поправки можно взять в качестве невозмущенных ВФ общие СФ операторов \widehat{j}^2 , \widehat{j}_z и \widehat{l}^2 , рассмотренные в п. 4.13. Учитывая тождество

$$2\widehat{s}\widehat{l} = \widehat{j}^2 - \widehat{l}^2 - \widehat{s}^2,$$

можно переписать выражение для оператора возмущения в виде

$$\widehat{V}_2 = \frac{\alpha^2 Z}{4} \frac{1}{r^3} \left(\widehat{j}^2 - \widehat{l}^2 - \widehat{s}^2 \right).$$

Таким образом, для поправки $E_2^{(1)}$ имеем выражение

$$E_2^{(1)} = \frac{Z\alpha^2}{4} \overline{r^{-3}} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \quad (l \neq 0),$$

$$E_2^{(1)} = 0 \quad (l = 0).$$

Используя результат задачи 5.6:

$$\overline{r^{-3}} = \frac{Z^3}{n^3 l(l+1/2)(l+1)},$$

получаем окончательное выражение для поправки $E_2^{(1)}$:

$$E_2^{(1)} = \frac{\alpha^2 Z^4}{4n^3} \left[\frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{l(l+1/2)(l+1)} \right] (1 - \delta_{l0}).$$

Выражение в квадратных скобках можно выразить через l для различных значений $j = l \pm \frac{1}{2}$ ($l \neq 0$):

$$j = l + \frac{1}{2} : \frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{l(l+1/2)(l+1)} = \frac{1}{(l+1/2)(l+1)},$$

$$j = l - \frac{1}{2} : \frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{l(l+1/2)(l+1)} = -\frac{1}{(l+1/2)l}.$$

Складывая поправки E_1 и E_2 при $j = l + 1/2$, имеем

$$E_{1+2}^+ = \frac{\alpha^2 Z^4}{2n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j} + \frac{1}{2j(j+1/2)} \right) = \frac{\alpha^2 Z^4}{2n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j+1/2} \right).$$

Аналогично, при $j = l - 1/2$

$$E_{1+2}^- = \frac{\alpha^2 Z^4}{2n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j+1} - \frac{1}{2(j+1)(j+1/2)} \right) = \\ = \frac{\alpha^2 Z^4}{2n^3} \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j+1/2} \right).$$

Таким образом, суммарную поправку при $l \neq 0$ можно представить в виде

$$E_{nj}^{(1)} = -\frac{\alpha^2 Z^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (10.31)$$

Формулы (10.29) показывают, что это выражение справедливо и при $l = 0$. Отметим, что выражение (10.31), определяющее *тонкую структуру* спектра атома водорода, впервые было получено Зоммерфельдом на основе старой квантовой теории.

Релятивистские поправки приводят к частичному снятию вырождения по l . Кроме главного квантового числа n , энергия уровней зависит и от значения полного момента j . Однако уровень с заданным n и j остается двукратно вырожденным. Число l может принимать значения $j = l \pm 1/2$. Этот результат не является следствием приближенного характера вычислений и сохраняется для точного решения. Такое вырождение указывает на существование дополнительного интеграла движения, не коммутирующего с оператором полного момента.

При учете спина электрона состояние частицы в центральном поле задается тройкой чисел n, j, l . Значение j принято указывать в виде правого нижнего индекса при нерелятивистском обозначении.

Отметим, что вычисление поправок высших порядков или рассмотрение точного решения в случае $Z\alpha \ll 1$ не представляют особого интереса по следующей причине. В классической электродинамике система заряженных частиц может быть описана с помощью функции Лагранжа, зависящей от координат и скоростей частиц, лишь с точностью до членов порядка $(v/c)^2$. В следующем порядке ($\sim (v/c)^3$) необходимо учитывать излучение. Вычисление поправок второго порядка по операторам \hat{V}_i приведет лишь к величинам порядка $(v/c)^4$.

В гл. 5 рассмотрение задачи двух тел привело нас при вычислении спектра атома водорода к задаче о движении частицы с приведенной массой в поле кулоновского центра. В этой главе мы использовали в качестве исходного пункта релятивистское уравнение

для движения заряда в кулоновском поле ядра. Такое приближение для задачи двух тел оправдано лишь постольку, поскольку можно пренебречь движением ядра. Уравнение для задачи о движении двух заряженных частиц со спином $1/2$ было получено Брейтом. Как следует из изложенного, это уравнение справедливо лишь с точностью до членов $(v/c)^2$.

ЗАДАЧИ

1. Найти унитарный оператор, осуществляющий преобразование Лоренца.

2. Доказать, что из уравнения Дирака для частицы в электромагнитном поле следует уравнение

$$\left[\left(\hat{\mathbf{p}}^\mu - \frac{e}{c} A^\mu \right) \left(\hat{\mathbf{p}}_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) + \frac{e\hbar}{2c} \sigma^{\mu\nu} F_{\mu\nu} - m^2 c^2 \right] \psi = 0,$$

где

$$\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} (\gamma^\mu \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu) = -\sigma^{\nu\mu},$$

а $F_{\mu\nu}$ — тензор электромагнитного поля.

3. Найти собственные значения оператора скорости релятивистской частицы со спином $1/2$. Этот оператор определяется соотношением

$$\hat{v}_i = -\frac{i}{\hbar} [\hat{r}_i, \hat{H}].$$

4. Вычислить производную от времени от оператора

$$\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{A}}.$$

Результат сравнить с классическим уравнением движения.

5. Доказать соотношения

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left[\mathbf{r} + \frac{i\hbar}{2mc} \beta \alpha \right] &= \frac{\beta \mathbf{p}}{m}, \\ \frac{d}{dt} \left[t + \frac{i\hbar}{2mc} \beta \alpha \right] &= \frac{\beta}{mc^2} \hat{H}. \end{aligned}$$

6. Доказать, что релятивистский аналог оператора Рунге–Ленца

$$\hat{B} = \frac{e^2 \mathbf{r}}{r} \hat{\Sigma} + \frac{i\hbar}{mc} (\hat{\Sigma} \hat{\mathbf{I}} + 1) \gamma^0 \gamma^5 (\hat{H} - mc^2 \gamma^0),$$

где

$$\gamma^5 = -i\gamma^0 \gamma^1 \gamma^2 \gamma^3,$$

коммутирует с гамильтонианом уравнения Дирака для частицы в кулоновском поле.

ПЕРЕХОДЫ

0. В предыдущих главах мы рассматривали только стационарные состояния систем. Они описывались СФ не зависящих от времени гамильтонианов. Средние значения наблюдаемых в таких состояниях не зависят от времени. Вне нашего рассмотрения остались два круга задач.

Во-первых, система может описываться гамильтонианом \hat{H} , не зависящим от времени, но состояние системы в некоторый момент $t = 0$ может не быть СФ \hat{H} . Возникает вопрос об изменении со временем средних значений наблюдаемых.

Во-вторых, гамильтониан \hat{H} может зависеть от времени явно. Если система взаимодействует с источником внешнего переменного поля, а влияние системы на источник пренебрежимо мало, то гамильтониан можно представить в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t). \quad (11.1)$$

Такая система по определению не имеет стационарных состояний. Если при $t \rightarrow \pm\infty$ внешнее поле $\hat{V}(t)$ обращается в нуль, то для описания системы удобно использовать полную систему СФ \hat{H}_0 . Тогда ВФ системы может быть представлена в виде

$$\psi(t) = \sum_n a_n(t) \varphi_n e^{i\omega_n t}, \quad (11.2)$$

где введено обозначение

$$\omega_n = \hbar^{-1} E_n,$$

которое мы будем постоянно использовать в дальнейшем. Пусть начальное ($t \rightarrow -\infty$) состояние системы описывается одной из СФ \hat{H}_0 :

$$\psi_- = \lim_{t \rightarrow -\infty} \psi(t) = \varphi_n.$$

В общем случае при $t \rightarrow +\infty$ ВФ системы

$$\psi_+ = \lim_{t \rightarrow +\infty} \psi(t) = \sum_m a_{nm} \varphi_m$$

не совпадает с ВФ начального состояния. Под действием внешнего поля система совершает переходы в другие стационарные состояния. Вероятность наблюдения системы при $t \rightarrow +\infty$ в состоянии φ_m — *вероятность перехода* из состояния $|n\rangle$ в состояние $|m\rangle$ — определяется

величиной

$$w_{nm} = |a_{nm}|^2.$$

Индекс n относится к начальному, а m — к конечному состояниям.

1. Пусть при $t < 0$ гамильтониан частицы

$$\hat{H}_- = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}_-(x)$$

обладает дискретным спектром и частица находится в стационарном состоянии $\psi_n(x)$ с энергией E_n . Пусть при $t = 0$ поле мгновенно изменяется:

$$\hat{H}_+ = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}_+(x).$$

Состояние $\psi_n(x)$ не есть, конечно, собственное состояние \hat{H}_+ . Вероятности переходов при внезапном возмущении определяются значениями коэффициентов a_{mn} в разложении $\psi_n(x)$ по собственным функциям \hat{H}_+ :

$$\psi_n(x) = \sum_k a_k \varphi_k(x).$$

Приближение внезапных переходов оправдано, если интервал Δt , за которые происходит изменение поля, мал по сравнению с величинами

$$\frac{1}{\omega_{nk}} = \frac{\hbar}{E_n - E_k},$$

где E_k относится к конечным состояниям.

В качестве примера рассмотрим вероятность перехода атома трития H^3 в основное и возбужденные состояния иона He^{3+} при β^- -распаде ядра. Время изменения потенциала ядра по порядку величины равно времени пролета β -электрона через атом:

$$\Delta t \approx \frac{a}{v_0} \approx a_0 \sqrt{\frac{2m}{E_\beta}},$$

где a_0 — боровский радиус. Это время мало по сравнению с характерным атомным временем $T_a = \hbar^3 m^{-1} e^{-4}$. Вероятность перехода в $1s$ -состояние определяется скалярным произведением ВФ начального и конечного состояний:

$$a_{1s,1s} = \int 2 \left(\frac{Z_1}{a_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{Z_1 r}{a_0}\right) \cdot 2 \left(\frac{Z_2}{a_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{Z_2 r}{a_0}\right) \cdot r^2 dr,$$

$$w_{1,1} = |a_{1,1}|^2 = \left(\frac{8}{9}\right)^3 \approx 0,70. \quad (11.3)$$

Здесь Z_1 и Z_2 — начальный и конечный заряды ядра. Заметим, что переходы в состояние с $l \neq 0$ невозможны из-за ортогональности

угловых частей ВФ. Аналогично вычисляется и $w_{1s,2s} = 0,25$. Таким образом, при β^- -распаде ядра атома трития образующийся ион He^{3+} будет с подавляющей вероятностью находиться в основном или в первом возбужденном состояниях.

2. Задача об эволюции состояния $\psi_n(x)$, приготовленного в момент $t = 0$ мгновенным изменением поля $\hat{U}_- \rightarrow \hat{U}_+$, представляет особый интерес, если гамильтониан \hat{H}_+ обладает непрерывным спектром. Физически реализуемые состояния частиц описываются ВФ, локализованными в некоторой области пространства (принадлежащими L^2), и не могут совпадать с ВФ непрерывного спектра.

Состояние, которое описывается функцией из L^2 , представляющей суперпозицию ВФ непрерывного спектра, называется *волновым пакетом*. Задачи об эволюции волновых пакетов относятся к первому типу задач, упомянутых в п. 11.0.

Рассмотрим волновой пакет свободного движения, который при $t = 0$ имел вид

$$\psi(x, 0) = \exp\left(-\frac{x^2}{2a^2}\right).$$

Готовящее поле $\hat{U}_-(x)$ в этом случае представляет собой потенциал гармонического осциллятора:

$$\hat{U}_-(x) = \frac{\hbar^2}{2ma^4} x^2.$$

Поле \hat{U}_+ равно нулю. Спектральная функция $a(k)$ определяется выражением

$$a(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, 0) \exp(-ikx) dx = \frac{a}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{k^2 a^2}{2}\right).$$

Зависящая от времени ВФ имеет вид

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} a(k) \exp(i(kx - \omega t)) dk.$$

Вычисление интеграла дает

$$\psi(x, t) = \frac{a}{\sqrt{a^2 + i\frac{\hbar t}{ma}}} \exp\left[-\frac{x^2}{2\left(a^2 + i\frac{\hbar t}{m}\right)}\right].$$

Распределение плотности вероятности

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{ma^2}\right)^2}} \exp \left[-\frac{x^2}{\sqrt{a^4 + \left(\frac{\hbar t}{m}\right)^2}} \right]$$

с течением времени сохраняет ту же форму, что и в начальный момент, однако ширина распределения возрастает со временем: происходит расплывание волнового пакета. Расплывание становится существенным при

$$t > T = \frac{ma^2}{\hbar}.$$

Величину T естественно назвать временем жизни волнового пакета. Отметим, что аналогичный результат мы получим для любого волнового пакета, который при $t = 0$ описывается действительной ВФ. Наличие расплывания связано с законом дисперсии для свободных частиц $E(k) \sim k^2$.

3. Особыми чертами обладает процесс расплывания волнового пакета в центральном поле, имеющем вид барьера (рис. 38). Пусть приготовленное при $t = 0$ состояние описывается ВФ $\psi(r, 0)$, локализованной внутри барьера*. Схема отыскания зависящей от времени ВФ остается той же, что и в предыдущем пункте. Раскладывая начальную ВФ по системе ВФ стационарных состояний $\Phi(k, r)$, нормированных на δ -функцию от k , мы найдем спектральную плотность

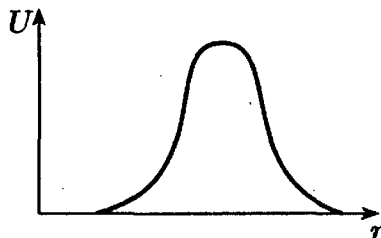


Рис. 38

$$A(k) = \int_0^{\infty} \psi(r, 0) \Phi(k, r) dr. \quad (11.4)$$

Зависящая от времени ВФ будет определяться интегралом

$$\psi(r, t) = \int_0^{\infty} A(k) \Phi(k, r) e^{-i\omega t} dk. \quad (11.5)$$

Пусть $f(k, r)$ есть решение радиального УШ с асимптотикой e^{-ikr} . Тогда функция $\Phi(k, r)$, имеющая асимптотику

$$\Phi(k, r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin[kr + \delta_0(k)],$$

где $\delta_0(k)$ — фаза рассеяния, может быть представлена в виде

$$\Phi(k, r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{2i} \left[\sqrt{S_0(k)} f(-k, r) - \frac{1}{\sqrt{S_0(k)}} f(k, r) \right], \quad (11.6)$$

где $S_0(k)$ — элемент матрицы рассеяния. Подставляя (11.6) в (11.4), спектральную плотность представим в виде

$$A(k) = \frac{1}{i} \left[\alpha(ik) \sqrt{S_0(k)} - \alpha(-ik) \frac{1}{\sqrt{S_0(k)}} \right], \quad (11.7)$$

где

$$\alpha(ik) = \int_0^{\infty} \psi(r, 0) \sqrt{\frac{2}{\pi}} f(k, r) dr.$$

Подставляя (11.6) и (11.7) в выражение (11.5), получим

$$\begin{aligned} \psi(r, t) &= \int_0^{\infty} \frac{1}{i} \left[\alpha(ik) \sqrt{S_0(k)} - \alpha(-ik) \frac{1}{\sqrt{S_0(k)}} \right] \times \\ &\times \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{2i} \left[\sqrt{S_0(k)} f(-k, r) - \frac{1}{\sqrt{S_0(k)}} f(k, r) \right] e^{-i\omega t} dk = \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} [\alpha(ik) S_0(k) - \alpha(-ik)] f(-k, r) e^{-i\omega t} dk + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} \left[\alpha(ik) - \alpha(-ik) \frac{1}{S_0(k)} \right] f(k, r) e^{-i\omega t} dk. \end{aligned}$$

Учитывая, что согласно (9.80)

$$S_0^{-1}(k) = S_0(k),$$

и заменяя во втором интеграле k на $-k$, получим

$$\psi(r, t) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} [\alpha(ik) S_0(k) - \alpha(-ik)] f(-k, r) e^{-i\omega t} dk. \quad (11.8)$$

Формула (11.8) точная. Найдем асимптотический вид $\psi(r, t)$ на больших расстояниях вне барьера. Тогда под интегралом в (11.8) можно заменить функцию $f(-k, r)$ ее асимптотическим значением

$$\psi(r, t) \approx -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} [\alpha(ik) S_0(k) - \alpha(-ik)] e^{i(kr - \omega t)} dk. \quad (11.9)$$

Введем новую переменную

$$y = \sqrt{\frac{iz}{2}} \left(k - \frac{r}{z} \right), \quad z = \frac{\hbar t}{m}.$$

Тогда формула (11.9) примет вид

$$\psi(r, t) \approx B \int_C e^{-y^2} [\alpha^+(y)S(y) - \alpha^-(y)] dy, \quad (11.10)$$

где

$$B = -\sqrt{\frac{1}{i\pi z}} \exp\left(i\frac{r^2}{2z}\right), \quad \alpha^\pm(y) = \alpha[\pm ik(y)].$$

Интегрирование в (11.10) ведется вдоль контура C — диагонали третьего и первого квадрантов плоскости комплексного y . Функции $\alpha^+(y)$ и $\alpha^-(y)$ не имеют особенностей. Если $S(y)$ не имеет особенностей, то контур C может быть смещен к действительной оси, а интеграл (11.10) вычислен методом перевала. В поле с потенциалом вида, изображенного на рис. 38, отсутствие связанных состояний очевидно. Возможно наличие особенностей $S(k)$, связанных с квазистационарными состояниями (см. п. 9.15). Пусть существует одно квазистационарное состояние

$$k_0 = q + i\epsilon.$$

Тогда элемент S -матрицы имеет вид

$$S(k) = M(k) \frac{(k - k_0^*)(k + k_0)}{(k - k_0)(k + k_0^*)},$$

где $M(k)$ — функция без особенностей. В плоскости комплексного переменного y

$$S(y) = M(y) \frac{\left[y + \sqrt{i\frac{z}{2}} \left(\frac{r}{z} - k_0^* \right) \right] \left[y + \sqrt{i\frac{z}{2}} \left(\frac{r}{z} + k_0 \right) \right]}{\left[y + \sqrt{i\frac{z}{2}} \left(\frac{r}{z} - k_0 \right) \right] \left[y + \sqrt{i\frac{z}{2}} \left(\frac{r}{z} + k_0^* \right) \right]}.$$

Рассмотрим полюсы $S(y)$. Они определяются равенствами

$$P_1 : y + \sqrt{i\frac{z}{2}} \left(\frac{r}{z} - q + i\epsilon \right) = 0,$$

$$P_2 : y + \sqrt{i\frac{z}{2}} \left(\frac{r}{z} + q + i\epsilon \right) = 0.$$

Изменение их положения со временем показано на рис. 39. Пусть $q > \epsilon$. Тогда при $z < r(q - \epsilon)^{-1}$ полюс P_1 лежит ниже действительной

оси. Контур интегрирования может быть смещен на действительную ось. Вычисление интеграла (11.10) методом перевала дает

$$\psi(r, t) = \psi_0(r, t) \approx B\sqrt{\pi}[\alpha^+(0)S(0) - \alpha^-(0)].$$

При $z > r(q - \varepsilon)^{-1}$ нужно учитывать вклад от полюса P_1 в первом квадранте. Тогда

$$\psi(r, t) \approx \psi_0(r, t) - 2\pi i B \alpha(ik_0) \exp(-y_0^2) \text{Res } S(P_1).$$

Второй (полюсный) член в этой формуле можно переписать в виде

$$\psi_P(r, t) \approx \sqrt{2\pi} \alpha(ik_0) M(k_0) \varepsilon \exp(iqr + \varepsilon r) \exp\left(-i \frac{(E_0 - i\Gamma/2)t}{\hbar}\right).$$

Здесь использованы введенные в главе 9 обозначения резонансной энергии и ширины уровня:

$$E_0 = (q^2 - \varepsilon^2) \frac{\hbar^2}{2m}, \quad \Gamma = 2q\varepsilon \frac{\hbar^2}{m}.$$

Таким образом, при наличии у системы квазистационарного состояния в расплывании волнового пакета можно выделить две стадии. Первая — нерезонансное расплывание, которое описывается членом $\psi_0(r, t)$. Оно связано с наличием в разложении начальной

волновой функции компонент с большими k и наиболее существенно при малых временах. Вторая — распад квазистационарного состояния, который описывается членом $\psi_P(r, t)$. В общем случае этот член не мал по сравнению с $\psi_0(r, t)$. Функцию $\psi_P(r, t)$ можно интерпретировать как ВФ состояния с комплексной энергией

$$E = E_0 - i\Gamma/2,$$

убывающую со временем по экспоненциальному закону. Отметим, что ВФ квазистационарного состояния возрастает при больших r . Поэтому приготовленный вол-

новой пакет не будет совпадать с ВФ квазистационарного состояния и распад не будет в точности следовать экспоненциальному закону.

4. Рассмотрим в качестве примера потенциал сферической оболочки

$$u(r) = q\delta(r - a).$$

Рассмотрим s -случай. Особенности S -матрицы будут определяться, согласно (9.76), уравнением

$$1 + i\frac{\pi}{2} \int_0^\infty H_{1/2}^{(0)}(kr) u(r) \varphi_0(kr) r dr = 0. \quad (11.11)$$

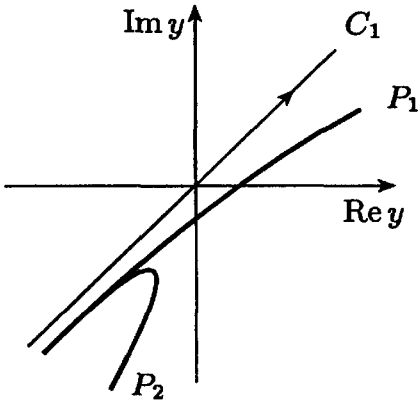


Рис. 39

Для вычисления корней этого уравнения нам даже не надо определять регулярное решение УШ при всех r . Очевидно, что при $r \leq a$ оно совпадает с $J_{1/2}(kr)$. Используя равенства

$$H_{1/2}^{(0)}(z) = -i\sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{iz}, \quad J_{1/2}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin z,$$

перепишем уравнение (11.11) в виде

$$1 + i\frac{\theta}{2\tau} - i\frac{\theta}{2\tau} e^{2i\tau} = 0. \quad (11.12)$$

Здесь введены обозначения: $\tau = ka$, $\theta = qa$. Полагая $2\tau = x + iy$ и приравнявая нулю действительную и мнимую части (11.12), находим

$$y + \theta - \theta e^{-y} \cos x = 0, \quad x + \theta e^{-y} \sin x = 0.$$

Этой системе удобно придать вид

$$e^y = -\theta \frac{\sin x}{x}, \quad \cos x = \left(1 + \frac{y}{\theta}\right) e^y.$$

Очевидно, что второе из этих уравнений определяет действительную кривую только при $y < 0$. Полосы $S(k)$ вне мнимой оси лежат в нижней полуплоскости комплексного k в согласии с общим результатом. Графическое решение, определяющее положение полюсов, показано на рис. 40.

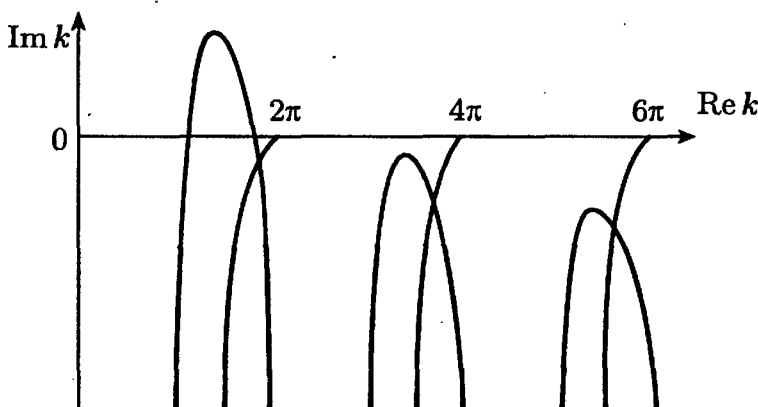


Рис. 40

Отметим следующие свойства полученного решения. По мере уменьшения прозрачности барьера (с ростом θ) действительные части полюсных значений q_n стремятся к $n\pi a^{-1}$, а резонансные уровни энергии — к значениям уровней энергии в сферической яме большой глубины. Мнимые части \varkappa_n полюсных значений сильно зависят от n . В пределе при $\theta \rightarrow \infty$

$$\varkappa_n \approx 2 \left(\frac{\pi n}{\theta}\right)^2 \frac{1}{a}.$$

Выражение для ширины уровней квазистационарных состояний можно представить в виде

$$\Gamma_n = 2\alpha_n q_n \frac{\hbar^2}{m} \approx D(E_n) \frac{\hbar}{ma} \bar{p}_n, \quad (11.13)$$

где $D(E_n)$ — коэффициент прохождения через барьер $q\delta(x)$ для частицы с энергией E_n (см. п 3.9).

Соотношение (11.13) сохраняется и в общем случае, если только область внутри барьера достаточно широка:

$$\hbar(\bar{p}_n)^{-1} \lesssim a.$$

В самом деле, решение с асимптотикой e^{ikr} можно рассматривать как стационарную ВФ системы с источником частиц единичной мощности в начале координат. Пусть при $t = 0$ источник выключен. Запишем уравнение непрерывности

$$\frac{d}{dt} \int_0^R |\psi(r, t)|^2 dr = j(R, t), \quad (11.14)$$

где R — точка, лежащая вне барьера. Учитывая, что при наличии квазистационарного состояния изменение $j(r, t)$ происходит медленно, можно положить

$$j = \frac{p}{m} \exp\left(-\frac{\Gamma}{2\hbar}t\right).$$

Плотность вероятности $w(r) = |\psi(r)|^2$ внутри барьера существенно больше, чем вне его. Поэтому, используя определение коэффициента прохождения $D(E)$, можно записать

$$\int_0^R w(r) dr \approx \frac{a}{D(E)}.$$

Учитывая уравнение непрерывности, получаем

$$\frac{a}{D(E)} \frac{\Gamma}{\hbar} \approx \frac{\bar{p}}{m},$$

откуда следует оценка (11.13). Используем формулу (11.13) для оценки скорости радиоактивного α -распада ядер. Потенциал взаимодействия α -частицы и ядра складывается из сильного короткодействующего притяжения при $r < r_0$ и кулоновского отталкивания (Z — заряд ядра до распада)

$$U(r) \approx \frac{2(Z-2)e^2}{r} = \frac{\alpha}{r}$$

при $r > r_0$. Для оценки коэффициента прохождения можно воспользоваться методом ВКБ:

$$D(E) \approx \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{r_0}^{\alpha/E} \sqrt{2m \left(\frac{\alpha}{r} - E \right)} dr \right].$$

Вычисление интеграла приводит к результату

$$D(E) \approx \exp \left[-\frac{2\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \arccos \sqrt{\frac{Er_0}{\alpha}} - \sqrt{\frac{Er_0}{\alpha}} \left(1 - \frac{Er_0}{\alpha} \right) \right].$$

Для типичных значений энергии α -частицы $E \sim 1$ МэВ, $\alpha \sim 4 \cdot 10^{-17}$ эрг·см, $r_0 \sim 7 \cdot 10^{-13}$ см

$$\frac{Er_0}{\alpha} \approx 2 \cdot 10^{-2},$$

и наибольшую роль играет первый член в квадратной скобке

$$D(E) \approx \exp \left[-(Z-2) \sqrt{\frac{\epsilon_0}{E}} \right]. \quad (11.15)$$

Здесь

$$\epsilon_0 = \frac{8\pi^2 m e^4}{\hbar^2}.$$

Такой вид коэффициента прохождения объясняет сильную зависимость времени жизни α -активных ядер от энергии α -частиц (закон Гейгера–Неттола).

5. Рассмотрим теперь переходы в системах, гамильтонианы которых зависят от времени явно*. Практически важен случай, когда зависящая от времени часть гамильтониана мала. Это позволяет использовать теорию возмущений. Пусть гамильтониан \hat{H}_0 обладает только дискретным спектром, а зависящая от времени часть $\hat{V}(t)$ мала по сравнению с \hat{H}_0 . Решение нестационарного УШ

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + \hat{V}(t) \right] \psi \quad (11.16)$$

представим в виде разложения по собственным функциям \hat{H}_0 :

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_k}{\partial t} = \hat{H}_0 \varphi_k = E_k \varphi_k, \quad (11.17)$$

$$\psi = \sum_k a_k(t) \varphi_k(t). \quad (11.18)$$

Подставляя (11.18) в (11.16) и учитывая (11.17), получим

$$i\hbar \sum_k \frac{da_k}{dt} \varphi_k = \sum_k a_k \hat{V} \varphi_k. \quad (11.19)$$

Умножая разложение (11.19) на φ_n скалярно, получим

$$i\hbar \frac{da_n}{dt} = \sum_k V_{nk}(t)a_k.$$

Зависимость от времени матричного элемента $V_{nk}(t)$ включает в себя, кроме зависимости $\widehat{V}(t)$, экспоненциальный множитель

$$e^{i\omega_{nk}t} = e^{\frac{i}{\hbar}(E_n - E_k)t}.$$

Пусть при $t = 0$ $a_{kn} = \delta_{kn}$. Представляя $a_{kn}(t)$ в виде разложения по степеням ϵ , в первом порядке получаем

$$i\hbar \frac{da_k^{(1)}}{dt} = V_{kn}(t),$$

откуда

$$a_{kn}^{(1)} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{kn}(t) dt. \quad (11.20)$$

Вероятность перехода равна

$$w_{nk} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} V_{kn} e^{i\omega_{kn}t} dt \right|^2. \quad (11.21)$$

Необходимым условием применимости (11.21) является сходимость интеграла: при $t \rightarrow \infty$ гамильтониан должен совпадать с невозмущенным \widehat{H}_0 . Если возмущение стремится к конечному пределу

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} \widehat{V}(t) = \widehat{V}_+ \neq 0,$$

то решение (11.20) следует преобразовать. Интегрируя по частям, получаем

$$a_{kn} = -\frac{V_{kn}(t)e^{i\omega_{kn}t}}{\hbar\omega_{kn}} + \int_{-\infty}^t \frac{\partial V_{kn}}{\partial t} \frac{e^{i\omega_{kn}t}}{\hbar\omega_{kn}} dt.$$

Первый член в этой формуле в пределе $t \rightarrow \infty$ определяет поправку первого порядка к ВФ состояния ψ (см. формулу (6.14)). Вероятность перехода определяется квадратом второго члена:

$$w_{nk} = \frac{1}{\hbar^2 \omega_{nk}^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial V_{kn}}{\partial t} e^{i\omega_{kn}t} dt \right|^2. \quad (11.22)$$

В предельном случае внезапного включения поля

$$\frac{\partial V_{kn}}{\partial t} = V_{kn} \delta(t),$$

где $V_{kn} = \langle k | \hat{H}_+ - \hat{H}_- | n \rangle$, и формула (11.22) принимает вид

$$w_{nk} = \frac{|V_{kn}|^2}{\hbar^2 \omega_{kn}^2}. \quad (11.23)$$

Условие применимости формул (11.21)–(11.23) состоит в малости соответствующих вероятностей перехода. Поэтому результат (11.23) нельзя использовать для решения задачи, рассмотренной в п. 11.1.

Рассмотрим противоположный предельный случай, когда изменение $\hat{V}(t)$ за промежуток времени $\Delta t \sim \omega_{kn}^{-1}$ мало. В этом случае под интегралом (11.22) будет стоять произведение медленно меняющейся и быстро осциллирующей функции и значение интеграла будет малым. Рассмотрим возмущение

$$\hat{V}(t) = \hat{V}^0 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \alpha t \right).$$

Тогда интеграл в (11.22) вычисляется элементарно:

$$\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\alpha V_{kn}}{1 + (\alpha t)^2} e^{i\omega t} dt = V_{kn}^0 e^{-\omega_{kn}/\alpha},$$

и вероятность перехода

$$w_{kn} = \frac{|V_{kn}^0|^2}{\hbar^2 \omega_{kn}^2} e^{-\omega_{kn}/\alpha}$$

при $\omega_{kn} \gg \alpha$ оказывается экспоненциально малой. При медленном (адиабатическом) изменении внешнего поля система с подавляющей вероятностью будет оставаться в основном состоянии.

6. Рассмотрим важный частный случай возмущения, периодически зависящего от времени:

$$\hat{V}(t) = \hat{V}_0 \cos \omega t.$$

Тогда, согласно формуле (11.20),

$$a_{kn}^{(1)} = -\frac{V_{kn}}{2\hbar} \left[\frac{e^{i(\omega+\alpha)t} - 1}{\omega + \alpha} - \frac{e^{-i(\omega-\alpha)t} - 1}{\omega - \alpha} \right],$$

где мы ввели обозначение

$$\alpha = \omega_{kn}.$$

Полагая

$$S = \omega + \alpha, \quad R = \omega - \alpha,$$

для вероятности перехода получим выражение

$$w_{nk} = \frac{|V_{nk}|^2}{2\hbar^2} \left(\frac{1 - \cos Rt}{R^2} + \frac{1 - \cos St}{S^2} + \frac{1 + \cos 2\alpha t - \cos Rt - \cos St}{RS} \right). \quad (11.24)$$

Вероятность перехода периодически меняется во времени. Если частота внешнего поля близка к одной из собственных частот системы α , то $R \ll S$ и в формуле (11.24) можно пренебречь вторым и третьим членами:

$$w_{nk}(t) \approx \frac{|V_{nk}|^2}{2\hbar^2} \frac{1 - \cos Rt}{R^2}. \quad (11.25)$$

В частном случае точного резонанса ($R = 0$) вероятность перехода

$$w_{nk}(t) = \frac{|V_{nk}|^2}{2\hbar^2} t^2 \quad (11.26)$$

квадратично зависит от времени. Условием применимости формул (11.25), (11.26) является малость соответствующих вероятностей перехода.

Если частота внешнего поля близка к одной из собственных частот, $\omega_{01} = \alpha$, то наиболее вероятными будут переходы между состояниями $|0\rangle$ и $|1\rangle$. Пренебрегая переходами в другие состояния, можно ограничиться рассмотрением двухуровневой системы. Отметим, что из (11.25) следует, что при рассмотрении двухуровневой системы мы можем заменить оператор \hat{V} неэрмитовым оператором

$$\hat{V}(t) \approx \hat{V}_0 \cdot \frac{1}{2} e^{-i\omega t}.$$

Пусть на двухуровневую систему действует внешнее поле

$$\hat{V}(t) = \hat{V}_0 f(t) e^{-i\omega t}.$$

Ограничившись рассмотрением состояний $|0\rangle$ и $|1\rangle$, мы можем представить ВФ системы в виде

$$\psi(x, t) \approx a(t)\varphi_0(x)e^{i\omega_0 t} + b(t)\varphi_1(x)e^{i\omega_1 t}.$$

Уравнения для коэффициентов разложения $a(t)$, $b(t)$ имеют вид

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{da}{dt} &= V_{01} f(t) e^{i\delta t} b, \\ i\hbar \frac{db}{dt} &= V_{01} f(t) e^{-i\delta t} a. \end{aligned} \quad (11.27)$$

Здесь введено обозначение δ для расстройки частот системы и поля:

$$\delta = \omega_{10} - \omega.$$

Исключая a из второго уравнения системы (11.27), получаем

$$\frac{d^2 b}{dt^2} - \frac{db}{dt} \left[\frac{d}{dt} \ln f(t) + i\delta \right] + \frac{|V_{01} f(t)|^2}{\hbar^2} b = 0. \quad (11.28)$$

Решение уравнения (11.28), удовлетворяющее начальному условию $b(-\infty) = 0$ при $\delta = 0$, имеет вид

$$b(t) = \sin \int_{-\infty}^t \frac{V_{01} f(t)}{\hbar} dt.$$

Вероятность перехода при $t \rightarrow \infty$ в состояние $|1\rangle$,

$$w_{01} = \sin^2 \frac{V_{01}}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) dt = \sin^2 \Omega,$$

зависит от единственного параметра Ω . При значениях

$$\Phi = 2\Omega = (2n + 1)\pi$$

система с достоверностью переводится в другое состояние. Такой импульс внешнего поля называется π -импульсом. При

$$\Phi = 2n\pi$$

система с достоверностью остается в начальном состоянии.

Рассмотрим случай отличной от нуля расстройки при $f(t) = \text{const}$ (прямоугольный импульс). Решение уравнения (11.28) имеет в этом случае вид

$$b(t) = c_1 e^{iq_1 t} + c_2 e^{iq_2 t},$$

где

$$q_1 = -\frac{\delta}{2} + \tilde{\Omega}, \quad q_2 = \frac{\delta}{2} + \tilde{\Omega},$$

$$\tilde{\Omega} = \sqrt{\frac{|V_{01}|^2}{\hbar^2} + \frac{\delta^2}{4}}.$$

Пусть при $t = 0$ система находится в состоянии $|0\rangle$ ($b(0) = 0$). Соответствующее решение имеет вид

$$b(t) = -i \frac{V_{01}}{\hbar \tilde{\Omega}} \exp\left(-i \frac{\delta t}{2} \sin \tilde{\Omega} t\right).$$

Зависящая от времени вероятность перехода есть

$$w(t) = \frac{|V_{01}|^2}{\hbar^2 \tilde{\Omega}^2} \sin^2 \tilde{\Omega} t.$$

При наличии расстройки двухуровневая система не может быть с достоверностью переведена в состояние $|1\rangle$. Максимальное значение вероятности

$$w_+ = \left[1 + \left(\frac{\delta \hbar}{2V}\right)^2\right]^{-1/2}$$

при заданной расстройке тем ближе к единице, чем больше $|V_{01}|$.

7. Выше мы рассматривали переходы между состояниями дискретного спектра под действием когерентного внешнего поля

$$\hat{V}(t) = \hat{V} \cdot f(t)e^{i\omega t}.$$

Рассмотрим в рамках теории возмущений переходы между парой уровней под действием импульса резонансного внешнего поля ($\omega = \omega_{10}$), амплитуда которого $f(t)$ обращается в нуль при $t > T$, $t < 0$, а в интервале $0 < t < T$ представляет случайный стационарный гауссов процесс с равным нулю средним

$$\langle f(t) \rangle = 0$$

и заданной функцией корреляции

$$B(\tau) = \langle f(t)f(t+\tau) \rangle.$$

Под усреднением здесь понимается усреднение по различным реализациям случайного процесса. Вероятность перехода в теории возмущений определяется формулой (11.21):

$$w_{01} = \frac{|V_{01}|^2}{\hbar^2} \left| \int_0^T f(t) dt \right|^2 = \frac{V^2}{\hbar^2} F(T).$$

Так как $f(t)$ — случайный процесс, то наибольший интерес представляет *среднее по реализациям* значение вероятности перехода $\overline{w_{01}}$. Среднее же значение функции $F^2(T)$ выражается формулой*

$$\langle F^2(T) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \sin^2 \frac{\omega T}{2} \frac{4}{\omega^2} g(\omega) d\omega, \quad (11.29)$$

где спектральная плотность случайного процесса $g(\omega)$ есть фурье-образ функции корреляции

$$g(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} B(\tau) e^{-i\omega\tau} d\tau.$$

В качестве примера рассмотрим экспоненциально коррелированный процесс

$$B(\tau) = f^2 e^{-|\tau|/\theta},$$

где θ — характерное время корреляции. Тогда

$$g(\omega) = f^2 \frac{\theta}{\pi} \frac{1}{1 + (\theta\omega)^2}.$$

При подстановке последнего выражения в (11.29) интеграл вычисляется элементарно:

$$\langle F^2(T) \rangle = f^2 \cdot 2\theta^2 \left[\frac{T}{\theta} - 1 + e^{-T/\theta} \right]. \quad (11.30)$$

Зависимость функции $\langle F^2 \rangle$ от T показана на рис. 41. При $T \ll \theta$ $\langle F^2(T) \rangle \approx f^2 T^2$ — вероятность перехода меняется со временем квадратично, как и в случае когерентного поля. При $T \gg \theta$ второй и третий члены в скобке в формуле (11.30) несущественны и

$$\langle F^2(T) \rangle = f^2 \cdot 2T\theta = f^2 \cdot 2\pi g(0)T.$$

Последнее выражение применимо не только для выбранной функции корреляции. В самом деле, в подынтегральном выражении формулы (11.29) функция $g(\omega)$ заметно отлична от нуля при $\omega \lesssim \theta^{-1}$ и плавно меняется в этой области. Первая же подынтегральная функция отлична от нуля главным образом в области $\omega \lesssim T^{-1}$. Поэтому при $T \gg \theta$ можно приближенно положить

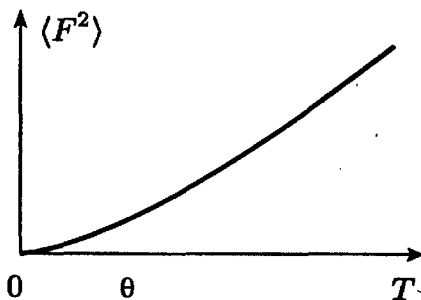


Рис. 41

$$\langle F^2(T) \rangle \approx g(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \sin^2 \left(\frac{\omega T}{2} \right)^2 \cdot \frac{4}{\omega^2} d\omega = 2\pi T g(0).$$

Таким образом, если длительность импульса внешнего поля велика по сравнению со времени корреляции, то вероятность перехода линейно растет со временем:

$$w_{01} = V_{01}^2 \hbar^{-2} \cdot 2\pi g(0)T. \quad (11.31)$$

В общем случае нерезонансного поля выражение для средней вероятности перехода имеет такой же вид, с заменой $g(0)$ на $g(\omega - \omega_{10})$. Поэтому формулу (11.31) удобно представить в виде

$$w_{01} = V_{01}^2 \hbar^{-2} \cdot 2\pi I(\omega_{01})T, \quad (11.32)$$

где $I(\omega_{01})$ — спектральная плотность амплитуды поля на частоте перехода.

Формула (11.32) выведена из теории возмущений. Поэтому она применима только при не слишком больших T , пока вероятность перехода w_{01} остается много меньше единицы.

8. Если при гармоническом воздействии на систему значение энергии

$$E_+ = E_0 + \hbar\omega$$

попадает в область непрерывного спектра, то переход в состояние E_+ будет резонансным. Однако выделение двухуровневой системы в этом случае невозможно, так как знаменатели в (11.24) будут малы для группы состояний с $E \approx E_+$.

Для вычисления вероятности переходов в этом случае удобно заменить непрерывный спектр конечных состояний дискретным квазинепрерывным. Это можно сделать, наложив на ВФ непрерывного спектра условие периодичности на границах куба с ребром L , предполагая, что L много больше размеров системы (ср. п. 6.13). Тогда можно использовать выражение для вероятности переходов

$$w_{0\nu} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} V_{0\nu} e^{i\omega_0 t} dt \right|^2. \quad (11.33)$$

При вычислении матричных элементов $V_{0\nu}$ использованы ВФ конечных состояний, нормированные на единицу в объеме L^3 . Найдем суммарную вероятность перехода в состояния непрерывного спектра. Она будет определять скорость распада начального состояния:

$$W = \sum_{\nu} \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} V_{0\nu} e^{i\omega_0 t} dt \right|^2. \quad (11.34)$$

Число дискретных уровней N_{ν} в интервале $(E_{\nu}, E_{\nu} + \Delta E_{\nu})$ в пределе $L^3 \rightarrow \infty$ пропорционально ширине интервала ΔE_{ν} . Определим функцию плотности состояний $\rho(\nu)$ такую, что

$$N(E_{\nu}, E_{\nu} + \Delta E_{\nu}) = \rho(\nu) \Delta E_{\nu}.$$

Функция $\rho(\nu)$ имеет размерность эрг⁻¹ и пропорциональна объему L^3 куба периодичности. Тогда в пределе $L \rightarrow \infty$ суммирование по ν можно заменить интегрированием:

$$W = \frac{1}{\hbar^2} \int dE_{\nu} \rho(\nu) \left| \int_{-\infty}^{+\infty} V_{0\nu} e^{i\omega_0 t} dt \right|^2.$$

Пусть на систему в течение времени T действует возмущение

$$\hat{V}(t) = \hat{v} e^{-i\omega t}. \quad (11.35)$$

Тогда интеграл по t вычисляется элементарно:

$$W = \frac{1}{\hbar^2} \int \rho(\nu) |v_{0\nu}|^2 \frac{4 \sin^2 \frac{\omega_{\nu 0} - \omega}{2} T}{(\omega_{\nu 0} - \omega)^2} dE_{\nu}.$$

При больших T функция

$$F(\nu, T) = 4 \frac{\sin^2 \frac{\omega_{\nu 0} - \omega}{2} T}{(\omega_{\nu 0} - \omega)^2}$$

меняется значительно быстрее, чем $\rho(\nu)$ и $|v_{0\nu}|^2$. Эти функции можно вынести из-под интеграла, взяв их значение в точке максимума $F(\nu, T)$ — точке $\omega = \omega_{\nu 0}$. Тогда

$$W = \frac{\rho(E_+) |v_{0+}|^2}{\hbar^2} \int \hbar \cdot 4 \frac{\sin^2 \frac{\omega_{\nu 0} - \omega}{2} T}{(\omega_{\nu 0} - \omega)^2} d\omega_{\nu 0}.$$

Вычисление интеграла по $\omega_{0\nu}$ элементарно:

$$W = \rho(E_+) |v_{0+}|^2 \frac{2\pi}{\hbar} T. \quad (11.36)$$

Таким образом, вероятность перехода в состояния непрерывного спектра под действием возмущения (11.35) пропорциональна длительности его действия. Иными словами, вероятность перехода в непрерывный спектр в единицу времени постоянна. Формула (11.36) называется *золотым правилом Ферми*.

Отметим аналогию между формулами (11.32) и (11.36): их можно записать в виде

$$\frac{W_{01}}{T} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{01}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega),$$

где δ -функция указывает на необходимость интегрирования по dE (с весом $\rho(E)$) в случае перехода в непрерывный спектр или по $d\omega$ (с весом $I(\omega)$) в случае перехода под действием некогерентного поля.

9. Состояния непрерывного спектра обычно вырождены. Если при $t = 0$ система находилась в состоянии $\psi_0(E)$ — собственном состоянии гамильтониана \hat{H}_0 , то под действием постоянного возмущения \hat{V} система может перейти в другое собственное состояние гамильтониана \hat{H}_0 — $\psi_\nu(E)$, соответствующее той же энергии. Вероятность такого перехода дается, согласно (11.36), формулой

$$W_{0\nu} = \rho(E) |V_{0\nu}|^2 \frac{2\pi}{\hbar} T. \quad (11.37)$$

Рассмотрим в качестве примера одномерное движение. Состоянию с данной энергией соответствуют две ВФ свободного движения:

$$\psi_+ = e^{ikx}, \quad \psi_- = e^{-ikx}.$$

Рассмотрим переходы между этими состояниями в слабом постоянном поле $V(x)$. Вводя «длину периодичности» L , получаем

$$\rho(E) = \frac{mL}{\pi\hbar p}.$$

Вероятность перехода за время T

$$W = \frac{mL}{\pi\hbar p} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} U(x) e^{-2ikx} L^{-1} dx \right|^2 \frac{2\pi}{\hbar} T.$$

Отношение вероятности перехода за единицу времени к плотности потока в одном из состояний ψ_+ , ψ_- есть, по определению, коэффициент отражения

$$R(E) = \frac{m^2}{\hbar^2 p^2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} U(x) e^{-2ikx} dx \right|^2. \quad (11.38)$$

Этот результат, полученный из нестационарной теории возмущений, совпадает с выражением (3.13), полученным из приближенного решения стационарного одномерного УШ.

10. В трехмерном случае вычисление вероятности переходов между состояниями с ВФ — плоскими волнами

$$\psi = \exp\left(i\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{\hbar}\right),$$

различающимися лишь направлениями \mathbf{p} , в поле $U(\mathbf{r})$ приводит, при использовании (11.37), к борновскому приближению для сечения рассеяния. В общем случае прямая задача теории рассеяния также может быть сформулирована как задача о переходах. Пусть функция $\psi(t)$ удовлетворяет УШ

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{V})\psi, \quad (11.39)$$

где \hat{H}_0 не зависит от времени. Проведем унитарное преобразование:

$$\varphi(t, x) = \exp\left(i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}\right)\psi(t, x), \quad \hat{h}(t) = \exp\left(i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}\right)\hat{V}\exp\left(-i\frac{\hat{H}_0 t}{\hbar}\right).$$

Тогда (11.39) примет вид

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \hat{h}\varphi. \quad (11.40)$$

Представление (11.40) для уравнений движения называют *представлением Дирака* или *представлением взаимодействия*. Введем унитарный оператор $\hat{U}(t_1, t_2)$ такой, что

$$\hat{U}(t_1, t_2)\varphi(t_2) = \varphi(t_1). \quad (11.41)$$

Из определения (11.41) следуют свойства оператора \hat{U} :

$$\begin{aligned} \hat{U}(t_1, t_1) &= \hat{1}, \quad \hat{U}^+(t_1, t_2) = \hat{U}(t_2, t_1), \\ \hat{U}(t_1, t_2)\hat{U}(t_2, t_3) &= \hat{U}(t_1, t_3). \end{aligned}$$

Оператор $\hat{U}(t_1, t_2)$, описывающий эволюцию системы, удовлетворяет уравнению движения

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}}{\partial t_1} = \hat{h}(t)\hat{U}.$$

Пусть φ_- и φ_+ — начальное и конечное состояния системы. Оператор $\hat{U}(t_1, t_2)$ при $t \rightarrow -\infty$ будем обозначать $\hat{U}_+(t)$, а $\hat{U}(t_1, t_2)$ при $t \rightarrow +\infty$ будем обозначать $\hat{U}_-(t)$:

$$\varphi(t) = \hat{U}_+(t)\varphi_-.$$

Предел оператора $\hat{U}_+(t)$ при $t \rightarrow +\infty$ мы будем называть оператором рассеяния \hat{S} :

$$\hat{S} = \lim_{t \rightarrow +\infty} \hat{U}_+(t).$$

Оператор \hat{S} унитарен, так как по определению унитарен \hat{U} . Физический смысл оператора \hat{S} очевиден: если φ_- — начальное состояние системы, то $\hat{S}\varphi_- = \varphi_+$ — соответствующее конечное состояние.

Пусть при $t \rightarrow \pm\infty$ внешнее воздействие $\hat{V}(t)$ адиабатически выключается. Тогда начальное состояние φ_- и конечное состояние $\varphi_+ = \hat{S}\varphi_-$ можно разложить по СФ гамильтониана \hat{H}_0 . Пусть $\varphi_- = \sum a \varphi_a$, где a — набор значений интегралов движения гамильтониана \hat{H}_0 . Вероятность перехода в состояние φ_b есть

$$w_{ba} = |\langle \varphi_b | \hat{S} | \varphi_a \rangle|^2.$$

Из рассмотрения, проведенного в п. 11.8, следует, что переходы возможны только при равенстве энергий начального и конечного состояний. Элементы \hat{S} -матрицы суть функции интегралов движения. Для случая рассеяния в центральном поле \hat{S} -матрица содержит только диагональные элементы $S_{ll, EE} = S_l(k)$, свойства которых рассматривались в гл. 9.

ЗАДАЧИ

1. Определить зависимость от времени дисперсии координаты волновых пакетов, которые при $t = 0$ описывались действительными волновыми функциями.

2. Рассмотреть изменение со временем произведения дисперсий $\overline{\Delta x^2} \overline{\Delta p^2}$ для пакета, рассмотренного в п. 11.2.

3. Пусть при $t = 0$ свободная частица описывалась ВФ

$$\psi(x, 0) = \varphi(x) \exp\left(\pm i \frac{\beta x^2}{\hbar}\right),$$

где $\varphi(x)$ — действительная четная функция из L^2 . Исследовать изменение дисперсии координаты со временем.

4. Рассмотреть расплывание волнового пакета

$$\varphi(x, 0) = \frac{2}{\pi\sqrt{a}} \frac{a^2}{x^2 + a^2}.$$

Меняется ли его форма со временем?

5. На гармонический осциллятор мгновенно накладывается внешнее однородное поле F . Найти вероятность перехода в n -е состояние, если при $t < 0$ осциллятор находился в основном состоянии.

6. Вычислить в приближении внезапных возмущений вероятность перехода мезона в мезоатоме с $Z \gg 1$ при распаде ядра из состояния $1s$ в состояние $2s$.

7. Вычислить вероятность того, что частица, находившаяся в δ -яме, двигавшейся с постоянной скоростью v , останется в связанном состоянии при внезапной остановке δ -ямы; зависящий от времени потенциал

$$\begin{aligned} U(x, t) &= -q\delta(x - vt) \quad (t < 0), \\ U(x, t) &= -q\delta(x) \quad (t > 0). \end{aligned}$$

8. При каких временах T применимо золотое правило Ферми для переходов в непрерывный спектр (11.36)?

9. Вычислить по теории возмущений коэффициент отражения $R(E)$ в поле

$$U(x) = -U_0 \frac{a^2}{x^2 + a^2}.$$

Сравнить с результатом расчета методом ВКБ.

10. На осциллятор, находившийся при $t \rightarrow -\infty$ в основном состоянии, действует однородное поле, меняющееся со временем по закону

$$F(t) = F_0 \operatorname{ch}^{-1}(\alpha t).$$

Найти вероятность переходов w_{0n} , не ограничиваясь первым приближением теории возмущений.

МАГНИТНОЕ ПОЛЕ

0. В предыдущих главах мы рассматривали различные случаи движения частицы во внешних полях, определявшихся потенциалом $\hat{U}(\mathbf{r})$, в том числе и в электростатических полях. При этом оператор Гамильтона содержал только операторы, действующие на пространственные переменные и не затрагивающие спиновую часть ВФ. Учет релятивистских поправок к УШ, следующих из уравнения Дирака для электрона (см п. 10.6), уже в первом порядке по v/c приводит к необходимости рассматривать взаимодействие собственного магнитного момента электрона с магнитным полем. Оператор этого взаимодействия

$$\hat{V} = \frac{e\hbar}{mc} \hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{H}}$$

действует на спиновые ВФ. Таким образом, наложение магнитного поля дает, в общем случае, способ воздействовать на спиновые состояния частиц.

1. Рассмотрим движение заряженной частицы без спина в электромагнитном поле. Классическая функция Лагранжа в поле, заданном скалярным потенциалом φ и векторным потенциалом \mathbf{A} , имеет вид

$$\mathcal{L} = \frac{mv^2}{2} + \frac{e}{c} \mathbf{A}\mathbf{v} - e\varphi.$$

В дальнейшем будем полагать $\varphi = 0$. Обобщенный импульс определяется соотношением

$$\mathbf{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{v}} = m\mathbf{v} + \frac{e}{c} \mathbf{A}.$$

В дальнейшем изложении отличие обобщенного импульса \mathbf{p} от кинематического $m\mathbf{v}$ будет играть существенную роль. Классическая функция Гамильтона определяется соотношением

$$H = \mathbf{p}\mathbf{v} - \mathcal{L} = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2.$$

Заменяя, в соответствии с основными положениями, обобщенный импульс на оператор с коммутационными соотношениями $\mathbf{A}\hat{\mathbf{b}}$, получим выражение для гамильтониана

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2. \quad (12.1)$$

Пусть векторный потенциал \mathbf{A} не зависит от времени (электрическое поле отсутствует). Гамильтониан (12.1) имеет вид квадрата эрмитового оператора. Поэтому, в силу результата задачи 1.15, все его собственные значения неотрицательны. В реальных случаях на больших расстояниях от источников магнитное поле \mathbf{H} стремится к нулю. Поэтому потенциал \mathbf{A} мы также можем выбрать обращаемся в нуль на бесконечности. Поскольку в этом случае

$$\hat{H} \rightarrow \frac{\hat{p}^2}{2m} \quad (r \rightarrow \infty),$$

то волновая функция для состояний с положительными значениями энергии не будет убывать. Итак, в реальном магнитном поле оператор \hat{H} не имеет дискретного спектра и движение частицы инфинитно. Следовательно, если область, в которой имеется магнитное поле, не ограничена стенками, то вместо стационарных состояний мы должны говорить о квазистационарных состояниях. В практических ситуациях, однако, времена жизни таких состояний оказываются весьма большими (см. задачу 12.7).

2. Рассмотрим идеализированный случай движения частицы в однородном поле. В классической механике движение частицы в области, где поле однородно, не чувствительно к свойствам поля вне этой области. Очевидно, в квантовой механике это не так: в любом реальном поле плотность вероятности $|\psi|^2$ не обращается в нуль тождественно ни в какой области пространства. Поэтому даже в идеализированной постановке задачи мы должны косвенно учесть правильные граничные условия, выбрав систему координат в соответствии с симметрией реального магнитного поля.

Пусть магнитное поле имеет аксиальную симметрию и линейные размеры области, в которой поле однородно, велики по сравнению с характерной длиной $\Lambda = (c\hbar/e\mathcal{H})^{1/2}$.

В этом случае воспользуемся цилиндрической системой координат. Векторный потенциал выберем в виде

$$A_\varphi = \frac{\mathcal{H}}{2}\rho, \quad A_\rho = A_z = 0.$$

УШ в цилиндрических координатах имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right) - i \frac{e\hbar}{2mc} \frac{\partial \psi}{\partial \varphi} + \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{8mc^2} \rho^2 \psi = E\psi.$$

Разделяя переменные, ищем решение в форме

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} R(\rho) e^{ik_z z} e^{im\varphi}. \quad (12.2)$$

Обозначим через γ и β величины

$$\gamma = \frac{e\mathcal{H}}{2c\hbar}, \quad \beta = \frac{2mE}{\hbar^2} - k_z^2. \quad (12.3)$$

Уравнение для радиальной части ВФ имеет, с учетом этих обозначений, вид

$$R'' + \frac{1}{\rho}R' + (\beta - \gamma^2\rho^2 - 2\gamma m - m^2\rho^{-2})R = 0. \quad (12.4)$$

Введем новую независимую переменную $\xi = \gamma\rho^2$. Тогда уравнение (12.4) переписывается в виде

$$\xi R'' + R' + \left(\lambda - \frac{\xi}{4} - \frac{m^2}{4\xi}\right)R = 0, \quad (12.5)$$

где

$$\lambda = \frac{\beta}{4\gamma} - \frac{m}{2}. \quad (12.6)$$

Легко найти асимптотики функции $R(\xi)$:

$$\begin{aligned} \xi \rightarrow \infty: & \quad R \sim e^{-\xi/2}, \\ \xi \rightarrow 0: & \quad R \sim \xi^{|m|/2}. \end{aligned}$$

Выделяя асимптотики, ищем решение уравнения (12.5) в виде

$$R(\xi) = e^{-\xi/2}\xi^{|m|/2}w(\xi). \quad (12.7)$$

Функция $w(\xi)$ находится из уравнения

$$\xi w'' + (1 + |m| - \xi)w' + \left(\lambda - \frac{|m|+1}{2}\right)w = 0,$$

решение которого представляет вырожденную гипергеометрическую функцию $F(\alpha, \gamma; z)$:

$$w = F\left[-\left(\lambda - \frac{|m|+1}{2}\right), |m|+1, \xi\right]. \quad (12.8)$$

Для того чтобы ВФ $R(\xi)$ обращалась в нуль при $\xi \rightarrow \infty$, первый из аргументов гипергеометрической функции должен быть целым неположительным числом:

$$n = \lambda - \frac{|m|+1}{2}. \quad (12.9)$$

Учитывая уравнения (12.3), (12.6), (12.9), получим окончательное выражение для энергетического спектра:

$$E_{nmk} = \hbar \frac{e\mathcal{H}}{mc} \left(n + \frac{|m|}{2} + \frac{m}{2} + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (12.10)$$

Таким образом, при заданном k спектр заряженной частицы в однородном магнитном поле оказывается эквидистантным с расстояниями между уровнями

$$\Delta E = \hbar\omega = \hbar \frac{e\mathcal{H}}{mc}.$$

Дискретные уровни, соответствующие движению в плоскости, перпендикулярной полю, называются *уровнями Ландау*. Найденная выше ВФ, определяемая формулами (12.2), (12.7) и (12.8), пригодна для описания стационарных состояний частицы, движение которой ограничено цилиндрической поверхностью радиуса R , большого по сравнению с характерно длиной λ . Если движение вдоль оси z свободное, то k может принимать любые значения и спектр непрерывен в области

$$E \geq \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Спектр становится дискретным, если движение по оси z финитно. В частности, при наличии стенок, перпендикулярных оси z , возможные значения k определяются условием

$$k_z = \frac{\pi}{L}n \quad (n = 1, 2, 3, \dots).$$

3. Рассмотрим магнитное поле, однородное и направленное вдоль оси z , в прямоугольном потенциальном ящике с размерами L_x, L_y, L_z . Найдем ВФ заряженной частицы и ее энергетический спектр в такой системе. Выберем векторный потенциал в виде

$$A_x = 0, \quad A_y = \mathcal{H}x, \quad A_z = 0. \quad (12.11)$$

Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \frac{m}{2}\omega^2 x^2 + x\omega\hat{p}_y,$$

где использовано введенное ранее обозначение

$$\omega = \frac{e\mathcal{H}}{mc}.$$

Разделяя переменные, ищем ВФ в виде

$$\psi = \chi(x) \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_y y + p_z z) \right].$$

Для компоненты $\chi(x)$ получаем уравнение

$$-\frac{\hbar}{2m}\chi'' + \frac{m}{2}\omega^2 \left(x + \frac{cp_y}{e\mathcal{H}} \right)^2 \chi = \left(E - \frac{p_z^2}{2m} \right) \chi.$$

Это уравнение совпадает с УШ для гармонического осциллятора. Используя результат, полученный в п. 3, находим выражение для спектра

$$E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m}$$

и для волновой функции

$$\psi = \exp \left[\frac{i}{\hbar} (p_y y + p_z z) - \frac{|e|\mathcal{H}}{2c\hbar} (x + x_0)^2 \right] H_n \left[\sqrt{\frac{e\mathcal{H}}{c\hbar}} (x + x_0) \right], \quad (12.12)$$

где

$$x_0 = \frac{cp_y}{e\mathcal{H}}.$$

Учет граничных условий на стенках ящика приводит к тому, что p_y и p_z могут принимать только дискретное множество значений

$$p_i = \hbar \frac{\pi}{L_i} n_i \quad (n_i = 1, 2, 3, \dots).$$

Влиянием стенок на компоненту волновой функции $\xi(x)$ можно пренебречь, если одновременно выполняются условия

$$L_x \gg \Lambda, \quad L_x \gg x_0.$$

Отметим, что вид ВФ не инвариантен относительно перемены $x \leftrightarrow y$, хотя в исходной постановке направления x и y равноправны. Причина этого, очевидно, связана с выбором векторного потенциала \mathbf{A} в виде (12.11).

4. В классической механике проекция траекторий заряда в магнитном поле на плоскость, перпендикулярную полю, есть окружность. В квантовой механике плотность вероятности в плоскости, перпендикулярной полю, может вообще не обладать аксиальной симметрией (12.12). Причина этого заключается в вырождении состояний заряженной частицы в магнитном поле с заданной энергией. В классической механике этому вырождению соответствует неопределенное положение оси симметрии траектории в плоскости xy .

Рассмотрим классически движение заряда в магнитном поле с векторным потенциалом

$$A_x = \frac{1}{2} \mathcal{H} y, \quad A_y = -\frac{1}{2} \mathcal{H} x, \quad A_z = 0. \quad (12.13)$$

Классическая функция Гамильтона имеет вид

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_x - \frac{e}{2c} \mathcal{H} y \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(p_y + \frac{e}{2c} \mathcal{H} x \right)^2 + \frac{1}{2m} p_z^2.$$

Отсюда следуют гамильтоновы уравнения движения:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{1}{m} \left(p_x - \frac{e}{2c} \mathcal{H} y \right), & \dot{p}_x &= -\frac{\omega}{2} \left(p_y + \frac{e}{2c} \mathcal{H} x \right), \\ \dot{y} &= \frac{1}{m} \left(p_y + \frac{e}{2c} \mathcal{H} x \right), & \dot{p}_y &= \frac{\omega}{2} \left(p_x - \frac{e}{2c} \mathcal{H} y \right), \\ \dot{z} &= \frac{1}{m} p_z, & \dot{p}_z &= 0. \end{aligned} \quad (12.14)$$

Решение уравнений для x и y имеет вид

$$\begin{aligned} x &= r \cos(\omega t - \varphi) + x_0, \\ y &= r \sin(\omega t - \varphi) + y_0, \end{aligned} \quad (12.15)$$

где x_0 и y_0 — координаты центра окружности. Используя уравнения (12.14), можно выразить координаты центра x_0, y_0 через канонически сопряженные величины (x, p_x, y, p_y) . Вычисляя, получим

$$y_0 = \frac{y}{2} + \frac{p_x}{m\omega},$$

$$x_0 = \frac{x}{2} - \frac{p_y}{m\omega}.$$

Перейдем к квантовой механике, сопоставляя классическим величинам эрмитовы операторы

$$\hat{x}_0 = \frac{\hat{x}}{2} - \frac{1}{m\omega} \hat{p}_y,$$

$$\hat{y}_0 = \frac{\hat{y}}{2} + \frac{1}{m\omega} \hat{p}_x.$$
(12.16)

Из формул (12.16) следует, что координаты центра окружности не коммутируют и не могут быть определены одновременно:

$$[\hat{x}_0, \hat{y}_0] = -\frac{i\hbar}{m\omega}.$$

Используя решение (12.15) для классических уравнений движения, можно найти вид операторов \hat{x}, \hat{y} в гайзенберговском представлении (см. п. 2.7). Представим решение (12.15) в виде

$$\hat{x}(t) = \hat{A} \cos \omega t - \hat{B} \sin \omega t + \hat{x}_0,$$

$$\hat{y}(t) = \hat{A} \sin \omega t + \hat{B} \cos \omega t + \hat{y}_0,$$
(12.17)

где \hat{A} и \hat{B} — операторы, не зависящие от времени. Положив в уравнениях (12.17) $t = 0$ и потребовав, чтобы

$$\hat{x}(0) = \hat{x}, \quad \hat{y}(0) = \hat{y},$$

определим выражение для операторов \hat{A}, \hat{B} . Окончательно получим

$$\hat{x}(t) = \left(\frac{\hat{p}_y}{m\omega} + \frac{\hat{x}}{2} \right) \cos \omega t + \left(\frac{\hat{p}_x}{m\omega} - \frac{\hat{y}}{2} \right) \sin \omega t + \left(\frac{\hat{x}}{2} - \frac{\hat{p}_y}{m\omega} \right),$$

$$\hat{y}(t) = \left(\frac{\hat{p}_y}{m\omega} + \frac{\hat{x}}{2} \right) \sin \omega t + \left(\frac{\hat{y}}{2} - \frac{\hat{p}_x}{m\omega} \right) \cos \omega t + \left(\frac{\hat{p}_x}{m\omega} + \frac{\hat{y}}{2} \right).$$
(12.18)

Таким образом, операторы в гайзенберговском представлении зависят от времени периодически. Это означает, что у любого волнового пакета, который при $t = 0$ может быть описан функцией вида

$$\Psi(x, y, z) = \varphi(x, y) \psi(z),$$

поперечная часть $\varphi(x, y)$ примет первоначальную форму через время

$$T = \frac{2\pi}{\omega},$$

совпадающее с периодом классического движения заряда в магнитном поле.

5. Рассмотрим движение заряженной частицы со спином $1/2$ в магнитном поле. Уравнение Паули имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \Psi - \mu_0 (\hat{\sigma} \mathcal{H}) \Psi.$$

Очевидно, в постоянном и однородном поле \mathcal{H}_z ВФ могут быть представлены в виде произведения орбитальной и спиновой функций, причем собственными спиновыми функциями будут состояния с заданной проекцией спина на направление поля:

$$\chi_1 = |+\rangle = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \end{vmatrix}, \quad \chi_2 = |-\rangle = \begin{vmatrix} 0 \\ 1 \end{vmatrix}.$$

При учете спина энергетический спектр имеет вид

$$E_P = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m} \pm \mu_0 \mathcal{H}. \quad (12.19)$$

Рассмотрим случай зависящего от времени поля. Нестационарное уравнение Паули имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{vmatrix} = \hat{H}_c \begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{vmatrix} - \mu_0 (\hat{\sigma}_z \mathcal{H}) \begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{vmatrix}, \quad (12.20)$$

где \hat{H}_c — гамильтониан заряженной частицы без спина (12.1). Представим волновую функцию в виде произведения двух зависящих от времени частей:

$$\begin{vmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{vmatrix} = \varphi(\mathbf{r}, t) \begin{vmatrix} s_1(t) \\ s_2(t) \end{vmatrix}, \quad (12.21)$$

где функция φ является решением уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \hat{H}_c \varphi.$$

Подставляя (12.21) в уравнение (12.20), для спиновой функции получим уравнение движения

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{vmatrix} s_1(t) \\ s_2(t) \end{vmatrix} = -\mu_0 (\hat{\sigma} \mathcal{H}) \begin{vmatrix} s_1(t) \\ s_2(t) \end{vmatrix}. \quad (12.22)$$

Если магнитное поле однородно, то его можно задать компонентой $\mathcal{H}_z(t)$, и уравнение (12.22) распадается на пару уравнений:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial s_1}{\partial t} &= -\mu_0 \mathcal{H}(t) s_1, \\ i\hbar \frac{\partial s_2}{\partial t} &= \mu_0 \mathcal{H}(t) s_2. \end{aligned}$$

Эти уравнения могут быть проинтегрированы:

$$s_1 = c_1 \exp\left(\frac{i\mu_0}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt\right), \quad s_2 = c_2 \exp\left(-\frac{i\mu_0}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}(t) dt\right),$$

где константы c_1 и c_2 определяются начальными условиями. Отметим, что вероятности проекций спина на направление магнитного поля со временем не меняются.

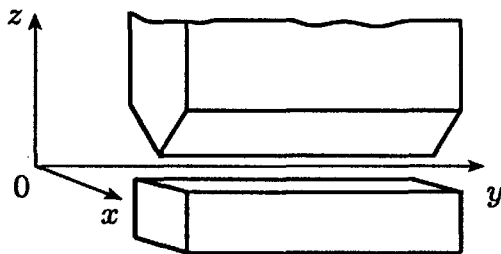


Рис. 42

6. Рассмотрим движение заряженной частицы со спином в неоднородном поле (опыт Штерна-Герлаха). Форма полюсных накопечников электромагнита и расположение координатных осей изображены на рис. 42. Плоскость zOy является плоскостью симметрии магнитного поля. При малых значениях z , x напряженность поля можно представить в виде

$$\mathcal{H}_x = kx, \quad \mathcal{H}_y = 0, \quad \mathcal{H}_z = \mathcal{H}_0 - kz. \quad (12.23)$$

Для простоты рассмотрим движение в таком поле нейтральных частиц с магнитным моментом μ и спином $1/2$ (нейтрон, атом водорода). Пусть волновой пакет, описывающий состояние частицы, характеризуется при $t = 0$ средними значениями

$$\bar{x} = \bar{y} = \bar{z} = 0, \\ \bar{\dot{x}} = \bar{\dot{z}} = 0, \quad \bar{\dot{y}} = v.$$

Если размеры волнового пакета малы по сравнению с областью, в которой применимы формулы (12.23), то уравнение Паули можно записать в виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix} = \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix} + \mu \left\{ \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} \mathcal{H}_x + \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix} \mathcal{H}_z \right\} \begin{vmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{vmatrix}.$$

Уравнение для каждой из компонент имеет вид

$$i\hbar \dot{\psi}_1 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_1 + \mu kx \psi_2 + \mu (\mathcal{H}_0 - kz) \psi_1, \\ i\hbar \dot{\psi}_2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi_2 + \mu kx \psi_1 - \mu (\mathcal{H}_0 - kz) \psi_2. \quad (12.24)$$

Будем искать решение этой системы в виде

$$\psi_1 = u_1 \exp\left(-i\frac{\mu \mathcal{H}_0}{\hbar} t\right), \quad \psi_2 = u_2 \exp\left(i\frac{\mu \mathcal{H}_0}{\hbar} t\right). \quad (12.25)$$

Подставляя (12.25) в (12.24), получим

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{u}_1 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u_1 + \mu k x u_2 \exp\left(2i\frac{\mu\mathcal{H}_0}{\hbar}t\right) - \mu k z u_1, \\ i\hbar\dot{u}_2 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u_2 + \mu k x u_1 \exp\left(-2i\frac{\mu\mathcal{H}_0}{\hbar}t\right) + \mu k z u_1. \end{aligned} \quad (12.26)$$

Экспоненциальные функции в правых частях уравнений осциллируют с периодом

$$T = 2\pi\frac{\hbar}{\mu\mathcal{H}_0}.$$

Для значений поля $\mathcal{H} \approx 10^3$ Гс и магнитных моментов порядка боровского магнетона

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc}$$

время осцилляций $T \approx 10^{-10}$ с мало по сравнению с характерным временем пролета частицы через систему

$$\tau = L/v.$$

Приняв длину полюсов магнита $L = 1$ см, а скорость частиц $v \approx \approx 10^3$ м/с (порядка тепловых скоростей молекул), получим $\tau \approx 10^{-5}$ с. Усреднив уравнения (12.26) по промежутку времени Δt при условии

$$T \ll \Delta t \ll \tau,$$

получим пару независимых уравнений для усредненных функций $\overline{u}_1, \overline{u}_2$:

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d\overline{u}_1}{dt} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\overline{u}_1 - \mu k z \overline{u}_1, \\ i\hbar\frac{d\overline{u}_2}{dt} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\overline{u}_2 + \mu k z \overline{u}_2. \end{aligned}$$

Каждое из этих уравнений имеет вид нестационарного УШ для частицы в однородном поле, направление которого зависит от значения проекции спина. Поскольку средние значения \bar{z} для каждого из пакетов удовлетворяют классическим уравнениям движения, то среднее значение \bar{z} будет увеличиваться для частиц в состоянии $|+\rangle$ и уменьшаться для частиц в состоянии $|-\rangle$. При достаточно большом времени пролета смещение волновых пакетов может значительно превышать их ширину. На выходе из прибора падающий пучок частиц расщепится на два пучка, в каждом из которых проекция спина на ось z будет иметь определенное значение.

7. При рассмотрении уравнения Паули в п. 10.6 мы нашли, что в нерелятивистском приближении частице со спином $1/2$ можно приписать магнитный момент

$$\mu = \mu_0 s.$$

Выше мы рассматривали взаимодействие спинового момента с внешним магнитным полем. Аналогичным образом можно описывать и взаимодействие между магнитными моментами частиц.

Если ядро атома обладает магнитным моментом, то при учете взаимодействия электронов с магнитным полем ядра атомные уровни энергии — вообще говоря, вырожденные — расщепляются. Такое расщепление называют *сверхтонкой структурой* уровней. Рассмотрим сверхтонкое расщепление в атоме водорода. Оператор взаимодействия имеет вид

$$\hat{V} = 2\mu_0 \left[(\mathbf{A}_p) \frac{1}{\hbar} + s\mathcal{H} \right]. \quad (12.27)$$

Будем рассматривать ядро как классический точечный магнитный диполь с моментом μ . Вектор-потенциал имеет вид

$$\mathbf{A} = - \left[\boldsymbol{\mu} \times \text{grad} \frac{1}{r} \right].$$

Вводя напряженность поля

$$\mathcal{H} = \text{rot } \mathbf{A}$$

и используя равенства

$$\text{rot} (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = \mathbf{A} \text{ div } \mathbf{B} - \mathbf{B} \text{ div } \mathbf{A} + (\mathbf{B} \nabla) \mathbf{A} - (\mathbf{A} \nabla) \mathbf{B},$$

$$\text{div grad} \frac{1}{r} = -4\pi\delta(\mathbf{r}),$$

для оператора (12.27) получим

$$\mu_0^{-1} \hat{V} = 4\pi\mu \hat{\mathbf{s}} \delta(\mathbf{r}) - \frac{\mu \hat{\mathbf{s}}}{r^3} + \frac{3(\hat{\mathbf{s}}\mathbf{r})(\mu\mathbf{r})}{r^5} - \frac{\hat{\mathbf{1}}\mu}{r^3}. \quad (12.28)$$

Для отыскания поправки к энергии в первом порядке теории возмущений надо вычислить среднее значение оператора возмущения \hat{V} по невозмущенным ВФ. Ограничимся рассмотрением s -случая. Тогда последний член в (12.28) обращается в нуль. При вычислении интеграла от второго и третьего членов следует проявить осторожность, так как интеграл от каждого из этих членов по отдельности расходится. Однако, учитывая, что

$$\frac{\mu \hat{\mathbf{s}}}{r^3} - \frac{3(\hat{\mathbf{s}}\mathbf{r})(\mu\mathbf{r})}{r^5} = -(\mu \nabla)(\hat{\mathbf{s}} \nabla) \frac{1}{r}, \quad (12.29)$$

а интеграл может зависеть лишь от относительной ориентации векторов $\hat{\mathbf{s}}$, μ , можно заменить (12.28) средним по направлениям значением

$$(\mu \nabla)(\hat{\mathbf{s}} \nabla) \frac{1}{r} \rightarrow \frac{1}{3} (\mu \hat{\mathbf{s}}) \nabla^2 \frac{1}{r}. \quad (12.30)$$

Итак

$$\overline{\hat{V}} = \frac{8\pi}{3} \mu_0 (\hat{\mathbf{s}}\boldsymbol{\mu}) \varphi_n^2(0) = \frac{8}{3} \mu_0 \frac{\hat{\mathbf{s}}\boldsymbol{\mu}}{n^3 a_0^3}.$$

Магнитный момент ядра μ связан с его спином i соотношением

$$\mu = \mu_N \hat{i}.$$

Таким образом, усредненный по ВФ оператор возмущения

$$\overline{V} = \frac{16}{3} \mu_0 \mu_N \frac{\hat{s} \hat{i}}{n^3 a_0^3}.$$

Собственные значения оператора $\hat{s} \hat{i}$ вычисляются так же, как и для $\hat{l} \hat{s}$:

$$\hat{s} \hat{i} = f(f+1) - i(i+1) - s(s+1),$$

где через f обозначен полный момент атома. Так как $s = 1/2$, то возможны лишь два значения f :

$$f = i \pm 1/2.$$

Для атома водорода ($i = 1/2$) уровень $1s_{1/2}$ расщепляется на два подуровня, расстояние между которыми

$$\Delta E = \frac{16}{3} \mu_0 \mu_p \frac{1}{a_0^3} (2i+1) \approx 0,93 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \quad (12.31)$$

мало по сравнению с расстоянием между компонентами тонкой структуры (см. гл. 10).

ЗАДАЧИ

1. Показать, что в классическом случае при движении заряда в поле (12.13) проекция кинематического момента на направление поля всегда положительна, в отличие от z -проекции обобщенного момента

$$l_z = xp_y - yp_x.$$

2. Найти коммутационные соотношения для компонент скорости v_i заряда в однородном магнитном поле.

3. Определить спектр и ВФ заряда в постоянных однородных и взаимно перпендикулярных электрическом и магнитном полях.

4. Частица со спином $1/2$ находится в переменном магнитном поле $\mathcal{H}_z(t)$. При $t = 0$ спиновая функция частицы имела вид

$$\chi = e^{-i\alpha} \cos \delta |+\rangle + e^{i\alpha} \sin \delta |-\rangle.$$

Определить среднее значение проекций спина на оси x , y и зависимость направления поляризации частицы от времени.

5. Определить спиновую ВФ частицы со спином $1/2$ в магнитном поле

$$\mathcal{H}_x = \mathcal{H} \sin \theta \cos \omega t, \quad \mathcal{H}_y = \mathcal{H} \sin \theta \sin \omega t, \quad \mathcal{H}_z = \mathcal{H} \cos \theta.$$

6. Два протона зафиксированы на расстоянии a в магнитном поле напряженности \mathcal{H} , образующей угол θ с линией, соединяющей протоны. Определить уровни энергии, рассматривая диполь-дипольное взаимодействие как возмущение.

7. Магнитное поле создается кольцами Гельмгольца — двумя круговыми витками проволоки, расположенными в параллельных плоскостях так, что центры их находятся на общей оси. Ток J по ним течет в одном направлении, радиусы колец и расстояние между их центрами — a . Движение вдоль оси колец ограничено стенками на расстоянии $\pm b$ от плоскости симметрии ($b \ll a$). Используя метод, изложенный в п. 11.3, оценить время жизни квазистационарного состояния электрона, соответствующего низшему уровню Ландау. Положить $J = 1$ А, расстояние $a = 10^2$ см.

ТОЖДЕСТВЕННЫЕ ЧАСТИЦЫ

0. В классической механике описание движения коллектива частиц в принципе сводится к определению закона движения каждой отдельной частицы. При этом совпадение физических параметров частиц не играет принципиальной роли.

Качественно иная ситуация в квантовой механике. Волновой функцией описывается поведение всего коллектива частиц. Отдельной частице при наличии взаимодействия нельзя сопоставить ВФ. Если ВФ коллектива совпадающих по своим физическим свойствам частиц отлична от нуля в некоторой области, то вопрос о том, какая именно частица может быть обнаружена в этой области, не имеет смысла. В квантовой механике совпадение физических свойств частиц приводит к их полной неразличимости.

1. Все известные частицы таковы, что ВФ, описывающая коллектив из N тождественных частиц,

$$\Psi(q_1, \dots, q_N),$$

где q_i означает совокупность координат и проекции спина частицы, при замене

$$q_i \rightarrow q_j, \quad q_j \rightarrow q_i$$

либо меняет знак (антисимметричная ВФ), либо остается неизменной (симметричная ВФ). Симметрия ВФ не зависит ни от взаимодействия между частицами, ни от наличия внешних полей и определяется следующим правилом.

Система тождественных частиц с целыми спинами — система *бозонов* — описывается симметричной ВФ. Система тождественных частиц с полуцелыми спинами — система *фермионов* — описывается антисимметричной ВФ. В нерелятивистской квантовой механике это правило следует рассматривать как одно из основных положений. Оно называется *принципом Паули* (в широком смысле).

Рассмотрим систему из N невзаимодействующих тождественных частиц. Гамильтониан такой системы имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N U(q_i) = \sum_{i=1}^N \hat{h}_i.$$

Пусть $\psi_i(q)$ — полная ортонормированная система СФ одночастичного гамильтониана \hat{h}_i .

Рассмотрим коллектив из N тождественных бозонов. Обозначим через (n_i) произведение функций ψ_i , зависящих от координат и спиновых переменных каких-то определенных n_i частиц. Порядок расположения сомножителей безразличен. Произведем упорядоченное разбиение множества из N частиц по бесконечному числу состояний, первое из которых содержит n_1 частиц, второе n_2 частиц и т. д. Число упорядоченных разбиений равно

$$\binom{N}{n_1 n_2 \dots n_i \dots} = \frac{N!}{\prod_{i=1}^{\infty} n_i!}.$$

Здесь $\sum n_i = N$. Мы считаем, что $(n_i) = 1$, если $n_i = 0$. Базисные ортонормированные функции для коллектива из N бозонов имеют вид

$$\Phi = \sum \binom{N}{n_1 n_2 \dots n_i \dots}^{-1/2} (n_1)(n_2) \dots (n_i) \dots \quad (13.1)$$

В этом выражении числа n_i фиксированы, а суммирование проводится по всем упорядоченным разбиениям. Функции (13.1) являются симметричными функциями.

Для двух частиц

$$\Phi(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_m(q_1)\psi_n(q_2) + \psi_n(q_1)\psi_m(q_2)],$$

если $m \neq n$. Если $m = n$, то

$$\Phi(q_1, q_2) = \psi_n(q_1)\psi_n(q_2). \quad (13.2)$$

Нормированная антисимметричная ВФ стационарного состояния системы тождественных фермионов может быть записана в виде детерминанта, составленного из одночастичных ВФ:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{Det} |\psi_{\alpha_i}(q_k)|. \quad (13.3)$$

Индекс i — номер строки ($1 \leq i \leq N$) — фиксирует состояния, в которых находятся частицы, причем индексы α расположены в порядке возрастания ($\alpha_1 < \alpha_2 < \dots < \alpha_N$). Индекс k ($1 \leq k \leq N$) указывает номер столбца. Функции, находящиеся в k -м столбце, зависят от координат и спиновой переменной k -частицы. Перестановка двух наборов координат (замена $q_i \leftrightarrow q_j$) есть перестановка двух столбцов детерминанта. Она приводит к изменению знака Ψ . Требование антисимметричности приводит к условию

$$\Psi(q_1, \dots, q_i, q_i, \dots, q_N) = 0,$$

что соответствует равенству двух столбцов матрицы. Вместе с этим ВФ обращается в нуль и при равенстве двух строк матрицы ($\alpha_k = \alpha_m$).

Таким образом, для того чтобы ВФ системы невзаимодействующих фермионов была отлична от нуля (т. е. чтобы состояние было физически реализуемо), необходимо, чтобы в каждом состоянии ψ_n находилось не более одной частицы. Это требование также называется *принципом Паули* (в узком смысле). Оно справедливо и для состояний системы слабовзаимодействующих фермионов, которые можно приближенно описывать с помощью детерминанта одночастичных ВФ. Для системы двух фермионов

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_m(q_1)\psi_n(q_2) - \psi_m(q_2)\psi_n(q_1)]. \quad (13.4)$$

2. Гамильтониан системы электрически взаимодействующих частиц в нерелятивистском приближении не зависит от спинов. Поэтому УШ удовлетворяет каждая из спиновых компонент ВФ. Полная ВФ может быть записана в виде

$$\Psi = \varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) \chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots).$$

Однако требования симметрии полной ВФ приводят к некоторым ограничениям на координатную ВФ $\varphi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots)$, поэтому из всех возможных решений УШ физически может реализоваться лишь некоторая часть.

Рассмотрим следствие симметрии для системы двух тождественных частиц. ВФ может быть записана в виде

$$\Psi = \theta(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2).$$

Функция $\theta(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)$, очевидно, всегда симметрична по отношению к перестановке $\mathbf{r}_1 \leftrightarrow \mathbf{r}_2$. Для $\Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ перестановка координат эквивалентна инверсии системы координат.

Для частиц со спином 0 спиновый множитель равен единице. Требование симметричности ВФ при перестановке эквивалентно требованию четности $\Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ при инверсии. Если взаимодействие частиц описывается центральным потенциалом $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, то переменные в УШ для функции Φ разделяются в сферической системе координат. Так как четность состояния совпадает с четностью орбитального момента, то система двух одинаковых частиц со спином нуль может находиться только в состояниях с четным орбитальным моментом l .

Рассмотрим систему двух частиц со спином $1/2$. Спиновые ВФ такой системы были рассмотрены в п. 4.11. Общая СФ операторов \hat{S}^2 и \hat{S}_z , соответствующая синглетному состоянию ($S = 0$), есть

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ |+-\rangle - |-+\rangle \}.$$

Очевидно, спиновая ВФ нечетна при перестановке частиц. Поэтому в состоянии с $S = 0$ $\Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ должна быть четной функцией: возможны только четные значения орбитального момента l . Спиновые

ВФ триплетного состояния

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |+, +\rangle, \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \{|+-\rangle + |-+\rangle\}, \\ |1, -1\rangle &= |+, -\rangle, \end{aligned}$$

очевидно, четны по отношению к перестановке координат. Следовательно, в состоянии с $S = 1$ орбитальная ВФ $\Phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ должна быть нечетной функцией: возможны только нечетные значения орбитального момента l .

В общем случае энергетический спектр задачи двух тел зависит от l . Поэтому возможные значения энергии зависят от полного спина системы. Про такую зависимость говорят, что она вызвана *обменным взаимодействием*. Если оператор взаимодействия $V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ двух тождественных частиц со спином $1/2$ мал (например, по сравнению с энергией внешнего поля $U(\mathbf{r}_i)$), то взаимодействие можно учесть как возмущение. Невозмущенным орбиталям

$$\psi_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_1(\mathbf{r}_1)\varphi_2(\mathbf{r}_2) \pm \varphi_1(\mathbf{r}_2)\varphi_2(\mathbf{r}_1)]$$

соответствуют в первом порядке теории возмущений средние значения энергии взаимодействия

$$E_{1,2} = A \pm J,$$

где

$$\begin{aligned} A &= \iint V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) |\varphi_1(\mathbf{r}_1)|^2 |\varphi_2(\mathbf{r}_2)|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2, \\ J &= \iint \varphi_1^*(\mathbf{r}_1)\varphi_1(\mathbf{r}_2)V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)\varphi_2^*(\mathbf{r}_1)\varphi_2(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \end{aligned} \tag{13.5}$$

Величина J , определяющая разность энергий, называется *обменным интегралом*.

3. При рассмотрении задачи рассеяния двух тождественных частиц орбитальная ВФ должна быть, в соответствии со сказанным в п. 13.2, симметрична или антисимметрична по отношению к перестановке координат частиц в зависимости от их суммарного спина. Это относится к взаимодействиям, при которых суммарный спин является интегралом движения.

Вместо граничного условия (9.4) мы выберем асимптотическое выражение ВФ рассеяния тождественных частиц в виде

$$\psi = e^{ikz} \pm e^{-ikz} + \frac{e^{ikr}}{r} [f(\theta) \pm f(\pi - \theta)].$$

Верхний знак (плюс) соответствует четной орбитальной ВФ (четный суммарный спин). Дифференциальное сечение рассеяния в этом

случае

$$d\sigma_s(\theta) = |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2 d\Omega. \quad (13.6)$$

Аналогично, дифференциальное сечение рассеяния для нечетного суммарного спина

$$d\sigma_a(\theta) = |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 d\Omega. \quad (13.7)$$

Формулы (13.6), (13.7) относятся к случаю столкновения частиц с заданным суммарным спином. Обычно опыты по рассеянию проводятся с неполяризованными пучками частиц и мишенями и наблюдается среднее значение эффективного сечения. Предполагая равновероятность осуществления каждого спинового состояния, для двух фермионов со спином $1/2$ получим

$$\sigma_{\text{эф}} = \frac{1}{4} \sigma_s + \frac{3}{4} \sigma_a.$$

4. В предыдущем изложении мы ограничивались случаем системы двух тождественных частиц. Для рассмотрения систем с большим числом тождественных частиц удобно использовать метод вторичного квантования.

Рассмотрим систему тождественных фермионов. Пусть $\psi_{\alpha_i}(q)$ есть некоторая полная система ортонормированных функций. Выбор этой системы определяется соображениями удобства. Эти функции совсем не обязаны быть собственными функциями одночастичного гамильтониана.

Для описания системы тождественных фермионов достаточно указать, какие одночастичные состояния заняты:

$$\Phi = |\dots 1_{\alpha_1} \dots 1_{\alpha_2} \dots 1_{\alpha_N} \dots\rangle. \quad (13.8)$$

Напомним, что все состояния перенумерованы и номера состояний в этой записи возрастают слева направо. Такая функция соответствует функции (13.3) — детерминанту, включающему строки с индексами α_i , соответствующими единицам в функции (13.8). Функцию (13.8) мы будем называть ВФ системы в *представлении чисел заполнения*.

Функцию Φ удобно представить в несколько ином виде. Пусть $|0\rangle$ есть ВФ *вакуумного состояния*, для которой все числа заполнения в (13.8) равны нулю. Введем операторы \hat{c}_i , \hat{c}_k^+ , удовлетворяющие соотношениям

$$\begin{aligned} \hat{c}_i \hat{c}_k + \hat{c}_k \hat{c}_i &= 0, \\ \hat{c}_i^+ \hat{c}_k^+ + \hat{c}_k^+ \hat{c}_i^+ &= 0, \\ \hat{c}_i \hat{c}_k^+ + \hat{c}_k^+ \hat{c}_i &= \delta_{ik}, \end{aligned} \quad (13.9)$$

действие которых на вакуумную ВФ в представлении чисел заполнения определяется правилом

$$\begin{aligned}\hat{c}_k^+ |\tilde{0}, 0_k, \tilde{0}\rangle &= |\tilde{0}, 1_k, \tilde{0}\rangle, \\ \hat{c}_k |\tilde{0}, 1_k, \tilde{0}\rangle &= |\tilde{0}, 0_k, \tilde{0}\rangle.\end{aligned}\quad (13.10)$$

Здесь и в дальнейшем мы обозначаем через \tilde{A} набор чисел заполнения; $\tilde{0}$ означает набор, состоящий из одних нулей. Операторы \hat{c}_i^+ и \hat{c}_k называются *ферми-операторами* рождения и уничтожения соответственно. Смысл названий ясен из формул (13.10). Свойства ферми-операторов при $i = k$ рассматривались в задачах к гл. 1.

Из формул (13.10) следует, что функция Φ может быть представлена в виде

$$\Phi = \hat{c}_{\alpha_1}^+ \hat{c}_{\alpha_2}^+ \dots \hat{c}_{\alpha_N}^+ |0\rangle. \quad (13.11)$$

Отметим существенность порядка операторов рождения в этой записи: такая функция соответствует детерминанту со строками $(\alpha_1, \alpha_2, \dots)$. Очевидно, что ВФ (13.11) удовлетворяет правилу симметрии, меняя знак при перестановке $\alpha_i \leftrightarrow \alpha_k$. Такой замене соответствует перестановка строк детерминанта (13.3).

Выше мы подразумевали, что речь идет о системе невзаимодействующих частиц. Однако функции Φ образуют полную ортонормированную систему, по которой может быть разложена произвольная ВФ системы взаимодействующих частиц, удовлетворяющая правилу симметрии.

5. Пусть гамильтониан системы тождественных фермионов имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \hat{h}_j + \sum_{i < j} \hat{V}_{ij}, \quad (13.12)$$

где \hat{h}_i — одночастичный гамильтониан:

$$\hat{h}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + U(x_i),$$

а \hat{V}_{ij} — потенциал взаимодействия между частицами i и j :

$$\hat{V}_{ij} = \hat{V}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|).$$

Поскольку ВФ, представленные в виде (13.11), обладают правильной симметрией, гамильтониан \hat{H} также удобно представить через операторы, действующие в пространстве чисел заполнения.

В дальнейшем для краткости будем обозначать через \hat{A} произведение операторов рождения, подобное записанному в (13.11). Очевидно, что

$$\hat{c}_\alpha \hat{A} |0\rangle = 0,$$

если в \hat{A} сопутствует \hat{c}_α^+ ;

$$\hat{c}_\alpha^+ \hat{c}_\alpha \hat{A}|0\rangle = \hat{A}|0\rangle,$$

если в \hat{A} есть оператор \hat{c}_α^+ .

Детерминантную ВФ (13.3) можно преобразить на основании известной теоремы Лапласа. Пусть в детерминанте D порядка N произвольно выбраны k строк (или k столбцов). Тогда сумма произведений всех миноров k -го порядка, содержащихся в выбранных строках (столбцах), на их алгебраические дополнения равна детерминанту. Итак, можно записать

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\alpha} (-1)^{k+n(\alpha)} \varphi_{\alpha}(q_k) M', \quad (13.13)$$

где $n(\alpha)$ — номер столбца, соответствующего состоянию α , а минор M' получен из детерминанта путем вычеркивания строки k и столбца $n(\alpha)$. В дальнейшем для краткости набор координат q_k будем обозначать просто индексом k . Аналогично

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} (-1)^{i+k+n(\alpha)+n(\beta)} \begin{vmatrix} \varphi_{\alpha}(i) & \varphi_{\beta}(i) \\ \varphi_{\alpha}(k) & \varphi_{\beta}(k) \end{vmatrix} M''. \quad (13.14)$$

Минор M'' получен из детерминанта путем вычеркивания строк i, k ($i < k$) и столбцов $n(\alpha), n(\beta)$ ($n(\alpha) < n(\beta)$). Легко убедиться, что

$$\hat{c}_\alpha \hat{A}|0\rangle = \frac{(-1)^{n(\alpha)-1}}{\sqrt{(N-1)!}} M', \quad (13.15)$$

$$\hat{c}_\alpha \hat{c}_\beta \hat{A}|0\rangle = \frac{(-1)^{n(\alpha)+n(\beta)}}{\sqrt{(N-2)!}} M''. \quad (13.16)$$

Формулы (3.13) можно записать в смешанных представлениях:

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\alpha} (-1)^{k+1} \varphi_{\alpha}(k) \hat{c}_\alpha \hat{A}|0\rangle, \quad (13.17)$$

$$\begin{aligned} \Phi &= \frac{1}{\sqrt{N(N-1)}} \sum_{\alpha} \sum_{\substack{\beta \\ n(\alpha) < n(\beta)}} (-1)^{i+k} [\varphi_{\alpha}(i) \varphi_{\beta}(k) - \varphi_{\beta}(i) \varphi_{\alpha}(k)] \hat{c}_\alpha \hat{c}_\beta \hat{A}|0\rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N(N-1)}} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} (-1)^{i+k} \varphi_{\alpha}(i) \varphi_{\beta}(k) \hat{c}_\alpha \hat{c}_\beta \hat{A}|0\rangle. \end{aligned} \quad (13.18)$$

При переходе к последней строке в (13.18) мы опустили условие $n(\alpha) < n(\beta)$ в суммировании, воспользовавшись антикоммутируемостью $\hat{c}_\alpha, \hat{c}_\beta$.

Используя смешанные представления, найдем вид оператора \hat{H} .
Учитывая формулы

$$\begin{aligned} h_k \varphi_\alpha(k) &= \sum_{\beta} \langle \beta | \hat{h} | \alpha \rangle \varphi_\beta(k), \\ V_{ik} \varphi_\alpha(i) \varphi_\beta(k) &= \sum_{\gamma\delta} \langle \gamma\delta | \hat{V} | \alpha\beta \rangle \varphi_\gamma(i) \varphi_\delta(k), \end{aligned} \quad (13.19)$$

получим

$$\begin{aligned} \hat{H}\Phi &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\beta\alpha} \langle \beta | \hat{h} | \alpha \rangle \sum_k (-1)^{k+1} \varphi_\beta(k) \hat{c}_\alpha \hat{A} | 0 \rangle + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{N(N-1)}} \sum_{\gamma\delta\alpha\beta} \langle \gamma\delta | \hat{V} | \alpha\beta \rangle \sum_{i < k} (-1)^{i+k} \varphi_\gamma(i) \varphi_\delta(k) \hat{c}_\alpha \hat{c}_\beta \hat{A} | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (13.20)$$

Перейдем теперь от смешанного представления к представлению вторичного квантования. Преобразование одночастичной части гамильтониана проводится с учетом формулы

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k (-1)^k \varphi_\beta(k) \hat{c}_\alpha \hat{A} | 0 \rangle = \hat{c}_\beta^+ \hat{c}_\alpha \hat{A} | 0 \rangle, \quad (13.21)$$

непосредственно следующей из (13.13) и (13.15). В левой части (13.21) стоит разложение детерминанта по первому столбцу, содержащему функции $\varphi_\beta(k)$:

$$\hat{H}^{(1)} = \sum_{\beta} \sum_{\alpha} \langle \beta | \hat{h} | \alpha \rangle \hat{c}_\beta^+ \hat{c}_\alpha. \quad (13.22)$$

Рассмотрим теперь второй член в (13.20):

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\sqrt{N(N-1)}} \sum_{\gamma\delta\alpha\beta} \langle \gamma\delta | \hat{V} | \alpha\beta \rangle \sum_{i < k} (-1)^{i+k} \varphi_\gamma(i) \varphi_\delta(k) \hat{c}_\alpha \hat{c}_\beta \hat{A} | 0 \rangle = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N(N-1)}} \cdot \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta\alpha\beta} \left\{ \langle \gamma\delta | \hat{V} | \alpha\beta \rangle \sum_{i < k} (-1)^{i+k} \varphi_\gamma(i) \varphi_\delta(k) \hat{c}_\alpha \hat{c}_\beta \hat{A} | 0 \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \langle \delta\gamma | \hat{V} | \beta\alpha \rangle \sum_{i < k} (-1)^{i+k} \varphi_\delta(i) \varphi_\gamma(k) \hat{c}_\beta \hat{c}_\alpha \hat{A} | 0 \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (13.23)$$

Учитывая равенство

$$\langle \gamma\delta | \hat{V} | \alpha\beta \rangle = \langle \delta\gamma | \hat{V} | \beta\alpha \rangle, \quad (13.24)$$

преобразуем правую часть формулы (13.23) следующим образом:

$$\begin{aligned} \widehat{H}^{(2)}\Phi = \frac{1}{\sqrt{N(N-1)}} \cdot \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta\alpha\beta} \langle \gamma\delta | \widehat{V} | \alpha\beta \rangle \sum_{i < k} (-1)^{i+k+1+2} \times \\ \times (\varphi_\gamma(i)\varphi_\delta(k) - \varphi_\delta(i)\varphi_\gamma(k)) \widehat{c}_\beta \widehat{c}_\alpha \widehat{A} | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (13.25)$$

Здесь мы учли антикоммутативность операторов \widehat{c}_α , \widehat{c}_β . Из формул (13.14) и (13.16) следует равенство

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{N(N-1)}} \sum_{i < k} (-1)^{i+k+1+2} \begin{vmatrix} \varphi_\gamma(i) & \varphi_\delta(i) \\ \varphi_\gamma(k) & \varphi_\delta(k) \end{vmatrix} \widehat{c}_\beta \widehat{c}_\alpha \widehat{A} | 0 \rangle = \\ = \widehat{c}_\gamma^+ \widehat{c}_\delta^+ \widehat{c}_\beta \widehat{c}_\alpha \widehat{A} | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (13.26)$$

Выражение, стоящее в левой части формулы (13.26), представляет собой разложение детерминанта по первому и второму столбцам. Итак, гамильтониан системы тождественных фермионов в представлении вторичного квантования имеет вид

$$\widehat{H} = \sum_{\beta\alpha} \langle \beta | \widehat{h} | \alpha \rangle \widehat{c}_\beta^+ \widehat{c}_\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta\alpha\beta} \widehat{c}_\gamma^+ \widehat{c}_\delta^+ \langle \gamma\delta | \widehat{V} | \alpha\beta \rangle \widehat{c}_\beta \widehat{c}_\alpha. \quad (13.27)$$

6. Рассмотрим теперь представление вторичного квантования для системы тождественных бозонов. Определим операторы \widehat{a}_i^+ , \widehat{a}_k , действие которых на функции чисел заполнения определяется правилами

$$\begin{aligned} \widehat{a}_k |\widetilde{A}, n_k, \widetilde{B}\rangle &= \sqrt{n_k} |\widetilde{A}, n_k - 1, \widetilde{B}\rangle, \\ \widehat{a}_k^+ |\widetilde{A}, n_k, \widetilde{B}\rangle &= \sqrt{n_k + 1} |\widetilde{A}, n_k + 1, \widetilde{B}\rangle. \end{aligned} \quad (13.28)$$

Из правил (13.28) следуют коммутационные соотношения

$$\begin{aligned} \widehat{a}_k \widehat{a}_i - \widehat{a}_i \widehat{a}_k &= 0, \\ \widehat{a}_k^+ \widehat{a}_i^+ - \widehat{a}_i^+ \widehat{a}_k^+ &= 0, \\ \widehat{a}_i \widehat{a}_k^+ - \widehat{a}_k^+ \widehat{a}_i &= \delta_{ik}. \end{aligned} \quad (13.29)$$

Операторы \widehat{a}_k , \widehat{a}_i^+ с коммутационными соотношениями (13.29) называются *бозе-операторами уничтожения и рождения* соответственно. Свойства таких операторов при $i = k$ рассматривались в задачах к гл. 1.

Волновой функции (13.1) сопоставим функцию от чисел заполнения и будем рассматривать числа заполнения как независимые переменные

$$\Phi = |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle. \quad (13.30)$$

В смешанном представлении Φ имеет вид

$$\begin{aligned}\Phi &= \sum_{i=1}^{\infty} \psi_i(q_\alpha) \sqrt{\frac{n_i}{N}} |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle = \\ &= \sum_{i=1}^{\infty} \psi_i(q_\alpha) \frac{1}{\sqrt{N}} \hat{a}_i |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle. \quad (13.31)\end{aligned}$$

Легко показать, что

$$\sum_{\alpha=1}^N \psi_i(q_\alpha) \sum (n_1)(n_2) \dots (n_i - 1) \dots = n_i \sum (n_1)(n_2) \dots (n_i), \quad (13.32)$$

где суммирование ведется по всем упорядоченным разбиениям. Из формулы (13.32) следует соотношение

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{\sqrt{N}} \psi_i(q_\alpha) |n_1, n_2, \dots, n_i - 1\rangle = \\ = \sqrt{n_i} |n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\rangle = \hat{a}_i^+ |n_1, n_2, \dots, n_i - 1, \dots\rangle. \quad (13.33)\end{aligned}$$

Используя формулы (13.19) и (13.31), получим

$$\begin{aligned}\hat{H}\Phi &= \sum_k \sum_i \langle k | \hat{h} | i \rangle \sum_{\alpha=1}^N \psi_k(q_\alpha) \frac{1}{\sqrt{N}} |n_1, n_2, \dots\rangle + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{lmik} \langle lm | \hat{V} | ik \rangle \sum_{\beta=1}^N \sum_{\alpha=1}^N \psi_l(q_\beta) \psi_m(q_\alpha) \frac{1}{\sqrt{N(N-1)}} \hat{a}_k \hat{a}_i |n_1, n_2, \dots\rangle. \quad (13.34)\end{aligned}$$

При помощи соотношения (13.33) совершим переход от смешанного представления к представлению, в котором переменными являются только числа заполнения. В результате этого перехода получим

$$\begin{aligned}\hat{H}|n_1, n_2, \dots\rangle &= \sum_{ki} \langle k | \hat{h} | i \rangle \hat{a}_k^+ \hat{a}_i |n_1, n_2, \dots\rangle + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{lmik} \langle lm | \hat{V} | ik \rangle \hat{a}_l^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_i \hat{a}_k |n_1, n_2, \dots\rangle.\end{aligned}$$

Таким образом, гамильтониан \hat{H} в представлении вторичного квантования имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{\alpha\beta} \langle \beta | \hat{h} | \alpha \rangle \hat{a}_\beta^+ \hat{a}_\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta\alpha\beta} \langle \gamma\delta | \hat{V} | \alpha\beta \rangle \hat{a}_\gamma^+ \hat{a}_\delta^+ \hat{a}_\beta \hat{a}_\alpha.$$

Это выражение формально совпадает с (13.27), отличаясь заменой ферми-операторов на бозе-операторы.

Отыскание собственных значений гамильтониана системы взаимодействующих тождественных частиц представляет сложную задачу, решение которой требует либо рассмотрения специальных простых моделей, либо использования приближенных методов.

7. Развитый выше формализм можно представить в несколько ином виде. Используя явный вид функций $\psi_i(q)$, введем операторы

$$\begin{aligned}\widehat{\psi}(q) &= \sum_i \psi_i(q) \widehat{b}_i, \\ \widehat{\psi}^+(q) &= \sum_i \psi_i^*(q) \widehat{b}_i^+.\end{aligned}\tag{13.35}$$

Здесь $\widehat{b}_i, \widehat{b}_i^+$ суть операторы \widehat{a}_i или \widehat{c}_i . Оператор $\psi^+(q_0)$ увеличивает полное число частиц в системе на единицу, рождая частицу в состоянии $q = q_0$. В самом деле, оператор \widehat{b}_i^+ создает частицу в состоянии $\psi_i(q)$. Поэтому $\psi^+(q_0)$ создает частицу с ВФ

$$\psi^+(q_0)|0\rangle = \sum_i \psi_i^*(q_0)\psi_i(q) = \delta(q - q_0),$$

так как использованная система функций $\psi_i(q)$ полна. Правила перестановки операторов $\widehat{\psi}_i, \widehat{\psi}_k^+$ следуют непосредственно из определения (13.35) и перестановочных соотношений для операторов \widehat{b}_i :

$$\widehat{\psi}(\xi)\widehat{\psi}^+(\eta) \pm \widehat{\psi}^+(\eta)\widehat{\psi}(\xi) = \delta(\xi - \eta).\tag{13.36}$$

Верхний знак (плюс) — для фермионов, нижний знак (минус) — для бозонов. Операторы $\widehat{\psi}$ позволяют представить гамильтониан системы тождественных частиц с парным взаимодействием в виде

$$\widehat{H} = \int \widehat{\psi}^+(\xi)\widehat{h}\widehat{\psi}(\xi) d\xi + \frac{1}{2} \iint \widehat{\psi}^+(\xi)\widehat{\psi}^+(\eta)\widehat{V}(\xi, \eta)\widehat{\psi}(\eta)\widehat{\psi}(\xi) d\xi d\eta.\tag{13.37}$$

Аналогия между формулами (13.35), представляющими разложение операторов $\widehat{\psi}$ по операторам \widehat{b}_i , и формулой

$$\psi(x) = \sum_i \varphi_i(x)a_i$$

для разложения произвольной функции по полной ортонормированной системе функций и послужила одной из причин, по которой описанный метод был назван методом вторичного квантования.

8. Рассмотрим кристаллическую решетку, узлы которой определяются вектором

$$\mathbf{q}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3.$$

Здесь \mathbf{a}_i — базисные векторы решетки, а $n = [n_1, n_2, n_3]$ — тройка целых чисел. Пусть в узлах решетки расположены атомы, каждый из которых имеет один валентный электрон. Пусть координатные ВФ валентного электрона для изолированного атома суть $\psi(\mathbf{r} - \mathbf{q}_n)$. Эти функции можно приближенно считать ортогональными:

$$\langle \psi(\mathbf{r} - \mathbf{q}_n) | \psi(\mathbf{r} - \mathbf{q}_m) \rangle = \delta_{nm}.$$

Пренебрежем возможностью электрона переходить от одного узла к другому. Рассмотрим, как зависит энергия системы от спинового состояния всех валентных электронов.

Выберем функции $\psi(\mathbf{r} - \mathbf{q}_n)$ в качестве базиса. Гамильтониан системы валентных электронов в представлении вторичного квантования имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{\beta\alpha} \langle \beta | \hat{h} | \alpha \rangle \hat{c}_\beta^+ \hat{c}_\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\gamma\delta\alpha\beta} \langle \gamma\delta | \hat{V} | \alpha\beta \rangle \hat{c}_\gamma^+ \hat{c}_\delta^+ \hat{c}_\beta \hat{c}_\alpha. \quad (13.38)$$

Здесь \hat{h} — оператор энергии валентного электрона в потенциальном поле всех атомов, а \hat{V} — энергия электростатического взаимодействия валентных электронов.

Преобразуем гамильтониан (13.38) к такому виду, чтобы объектом действия \hat{H} являлись функции от спиновых переменных всех валентных электронов. Каждый из индексов $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ есть совокупность чисел $[n_1, n_2, n_3, \sigma]$, указывающая номер узла и спиновое состояние электрона в этом узле.

Рассмотрим первый член суммы. При $\alpha = [n, +1/2]$ и $\beta = [n, -1/2]$ матричный элемент между этими состояниями равен нулю. Поскольку каждый атом содержит только один валентный электрон, то случай $\alpha = [n, \sigma], \beta = [n', \sigma']$ не реализуется. Поэтому в первом члене можно положить

$$\hat{c}_\beta^+ \hat{c}_\alpha = \hat{I}.$$

Матричный элемент $\langle \gamma\delta | \hat{V} | \alpha\beta \rangle$ отличен от нуля тогда, когда пары состояний (γ, α) и (δ, β) обладают одинаковыми значениями проекции спина. Так как каждый атом имеет один валентный электрон, то во второй сумме либо

$$\gamma = \alpha = [n, \sigma], \quad \delta = \beta = [n', \sigma'],$$

либо

$$\alpha = [n, \sigma], \quad \beta = [n', \sigma'], \quad \delta = [n, \sigma'], \quad \gamma = [n', \sigma].$$

В первом случае спиновые состояния электронов в узлах n и n' не изменяются. Во втором случае происходит «обмен спинов» между атомами n и n' .

Введем новый оператор $\hat{P}_{nn'}$, который производит обмен спинов. Тогда в первом случае

$$\hat{c}_\gamma^+ \hat{c}_\delta^+ \hat{c}_\beta \hat{c}_\alpha = \hat{c}_\gamma^+ \hat{c}_\alpha \hat{c}_\delta^+ \hat{c}_\beta = \hat{I},$$

а во втором

$$\hat{c}_\gamma^+ \hat{c}_\delta^+ \hat{c}_\beta \hat{c}_\alpha = -\hat{c}_\gamma^+ \hat{c}_\beta \hat{c}_\delta^+ \hat{c}_\alpha = -\hat{P}_{nn'}.$$

Заметим, что если спины валентных электронов у атомов n и n' параллельны, то $\hat{P}_{nn'} = \hat{I}$. Введем обменный интеграл

$$\begin{aligned} J(\mathbf{q}_n - \mathbf{q}_{n'}) &= J(\mathbf{q}_{n'} - \mathbf{q}_n) = \\ &= \iint \psi^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{q}_n) \psi^*(\mathbf{r}_2 - \mathbf{q}_{n'}) \hat{V} \psi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{q}_{n'}) \psi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{q}_n) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \end{aligned}$$

Зависимость J от $(\mathbf{q}_n - \mathbf{q}_{n'})$ следует из трансляционной симметрии. Таким образом, оператор \hat{H} может быть представлен в виде

$$\hat{H} = E - \frac{1}{2} \sum'_{n \neq n'} J(\mathbf{q}_n - \mathbf{q}_{n'}) \hat{P}_{nn'},$$

или*

$$\hat{H} = E_0 - \frac{1}{2} \sum'_{n \neq n'} J(\mathbf{q}_n - \mathbf{q}_{n'}) (\hat{P}_{nn'} - 1). \quad (13.39)$$

Если спины всех электронов в состоянии Φ параллельны, то $\hat{H}\Phi = E_0\Phi$.

Рассмотрим состояние Ψ , в котором суммарный спин системы на единицу меньше максимального. Обозначим через Φ_i состояние, отличающееся от Φ тем, что спин у i -го электрона перевернут. Решение УШ ищем в виде

$$\Psi = \sum_i A_i \Phi_i. \quad (13.40)$$

Подставляя функцию (13.40) в (13.39), получаем

$$-\frac{1}{2} \sum'_{n \neq n'} J(\mathbf{q}_n - \mathbf{q}_{n'}) (\hat{P}_{nn'} - 1) \sum_i A_i \Phi_i = (E - E_0) \sum_i A_i \Phi_i. \quad (13.41)$$

Если n и n' не равны i , то левая часть выражения (13.41) есть нуль. Рассматривая два случая 1) $n' = i$, $n \neq i$ и 2) $n = 1$, $n' \neq i$, мы

получим

$$-\sum_i \sum_n J(\mathbf{q}_n - \mathbf{q}_{n'}) (A_i \Phi_n - A_i \Phi_i) = (E_1 - E_0) \sum_i A_i \Phi_i.$$

Так как функции Φ_i и Φ_j при $i \neq j$ ортогональны, то, составляя скалярное произведение, получим

$$\sum_i J(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j) (A_j - A_i) = (E - E_0) A_j. \quad (13.42)$$

Для того чтобы функция Ψ удовлетворяла теореме Блоха, должно быть (ср. п. 6.14)

$$A_i = A e^{i\mathbf{k}\mathbf{q}_i}. \quad (13.43)$$

Подставляя (13.43) в (13.42), получаем

$$E_1 = E_0 + \sum_{n \neq 0} J(\mathbf{q}_n) (1 - e^{i\mathbf{k}\mathbf{q}_n}), \quad \mathbf{q}_n = \mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j. \quad (13.44)$$

Если $J > 0$, то энергия состояния с максимальным спином соответствует основному состоянию, а состояния с ВФ

$$\Psi = A \sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{q}_i} \Phi_i$$

и энергией (13.44) описывают возбужденные состояния системы, которые называются спиновыми волнами.

ЗАДАЧИ

1. Считая, что взаимодействие между нуклонами в триплетном состоянии описывается потенциалом задачи 5.18, объяснить отсутствие связанных состояний в системе двух нейтронов.

2. Найти зависимость дифференциального сечения рассеяния поляризованных тождественных частиц со спином $1/2$ от угла β между направлениями поляризации.

3. Потенциал взаимодействия тождественных фермионов со спином $1/2$ представляет сферический барьер ($B \gg 1$). Найти $\sigma(\theta)$ для медленных частиц в синглетном и триплетном состояниях.

4. Показать, что величина обменного расщепления уровней системы из двух слабо взаимодействующих тождественных фермионов со спином $1/2$ может быть представлена как СЗ обменного оператора Дирака

$$J\hat{P}_{12} = J \cdot \frac{1}{2} (1 + \hat{\sigma}_1 \sigma_2).$$

5. Найти СФ и СЗ оператора обменного взаимодействия системы из трех электронов

$$\hat{V} = -(J_{12}\hat{P}_{12} + J_{23}\hat{P}_{23} + J_{31}\hat{P}_{31}).$$

6. Показать, что оператор полного числа частиц

$$\hat{N} = \sum_i \hat{b}_i^+ \hat{b}_i$$

коммутирует с гамильтонианом в представлении вторичного квантования. Здесь \hat{b}_i , \hat{b}_i^+ — операторы Бозе или Ферми.

7. Для системы из N тождественных частиц со спином $1/2$ определить максимальное число различных уровней энергии с заданным значением полного спина S .

8. Показать, что оператор квадрата полного спинового момента системы N электронов может быть представлен в виде

$$\hat{S}^2 = N - \frac{N^2}{4} + \sum_{k < l} \hat{P}_{kl}.$$

9. Показать, что оператор

$$\hat{V} = - \sum_{k < l} J_{kl} \hat{P}_{kl}$$

коммутирует с оператором квадрата полного спинового момента.

АТОМ

0. Энергетический спектр и волновые функции атома водорода подробно рассмотрены в гл. 5. В этой главе мы рассмотрим методы отыскания энергетического спектра и ВФ атомов, содержащих более одного электрона. При этом учет тождественности атомных электронов и требование правильной симметрии ВФ будут играть существенную роль. Точные решения уравнения Шредингера для системы из трех и большего числа частиц не известны. Поэтому для нахождения спектров сложных атомов мы используем приближенные методы.

1. Простейшими после атома водорода и водородоподобных ионов системами являются двухэлектронный атом гелия ($Z = 2$) и гелиеподобные ионы ($Z > 2$). Рассмотрим вычисление энергии основного состояния атома гелия по теории возмущений. В нулевом приближении атом можно рассматривать как систему двух невзаимодействующих электронов в поле ядра:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} - Z\frac{e^2}{r_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - Z\frac{e^2}{r_2}. \quad (14.1)$$

ВФ нулевого приближения есть просто произведение одноэлектронных ВФ:

$$\Phi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \exp\left[-\frac{Z}{a_0}(r_1 + r_2)\right]. \quad (14.2)$$

Энергия системы в нулевом приближении есть

$$E_0 = -\frac{Z^2 e^2}{2a_0} \cdot 2. \quad (14.3)$$

Взаимодействие между электронами учтем как возмущение. Оператор возмущения имеет вид

$$\hat{V}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = +\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}.$$

В первом порядке теории возмущений поправка определяется средним значением энергии возмущения

$$E^{(1)} = V_{00} = \int \Phi_0^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \frac{e^2}{r_{12}} \Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2. \quad (14.4)$$

Для вычисления интеграла воспользуемся известным выражением

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{4\pi}{r_{>}} \sum_{l, m} \frac{1}{2l+1} \left(\frac{r_{<}}{r_{>}} \right)^l Y_{lm}(\theta_1, \varphi_1) Y_{lm}^*(\theta_2, \varphi_2), \quad (14.5)$$

где индексы $<$, $>$ относятся к меньшей и большей из величин r_1 и r_2 соответственно. Поскольку ВФ нулевого приближения сферически симметрична, отличный от нуля вклад в интеграл (14.4) дадут только члены с $l = m = 0$. Итак,

$$E^{(1)} = \frac{4e^2}{\pi} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^6 \int_0^\infty \exp\left(-2\frac{Zr_1}{a_0}\right) \times \\ \times \left[\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} \exp\left(-2\frac{Zr_2}{a_0}\right) r_2^2 dr_2 + \int_0^\infty \exp\left(-2\frac{Zr_2}{a_0}\right) r_2 dr_2 \right] r_1^2 dr_1. \quad (14.6)$$

Интегралы вычисляются элементарно:

$$E^{(1)} = 5Ze^2/8a_0.$$

Окончательное выражение для энергии основного состояния:

$$E = -Z^2 \frac{e^2}{a_0} + \frac{5}{8} Z \frac{e^2}{a_0}. \quad (14.7)$$

Этот результат можно улучшить, заменив в (14.2) величину Z вариационным параметром ζ . Напомним, что вычисления в первом порядке теории возмущений эквивалентны вычислениям с помощью вариационного метода при не наилучшем выборе пробной функции (см. п. 6.12). Итак,

$$E(\zeta) = \frac{e^2}{a_0} \left(\zeta^2 - 2Z\zeta + \frac{5}{8}\zeta \right).$$

Минимальное значение $E(\zeta)$, соответствующее значению

$$\zeta = Z - \frac{5}{16}, \quad (14.8)$$

есть

$$E_0^v = -\frac{e^2}{a_0} \left(Z^2 - \frac{5}{8}Z + \frac{25}{256} \right).$$

Меньшую, чем Z , величину «эффективного заряда» ζ можно объяснить взаимной экранировкой электронов. Экспериментально наблюдаемой величиной является энергия ионизации I , необходимая для отрыва одного электрона. Она равна разности $E_0^+ - E_0$, где E_0^+ — энергия оставшегося иона —

$$I = \frac{e^2}{2a_0} \left(Z^2 - \frac{5}{4}Z + \frac{25}{128} \right). \quad (14.9)$$

Для атома He формула (14.9) дает значение $I = 0,85$ а. е. Экспериментальное значение $I = 0,9035$ а. е. Как видно из сравнения формул (14.1) и (14.3), малым параметром теории возмущений ϵ в нашем случае является величина Z^{-1} . Поскольку для гелия $\epsilon = 0,5$, то согласие нашего расчета с экспериментом может расцениваться как удовлетворительное. Для гелиеподобных ионов с большим Z согласие с экспериментом улучшается. С другой стороны, при $Z = 1$ формула (14.9) дает отрицательное значение потенциала ионизации. Однако в действительности энергия ионизации иона H_1^- положительна: $I \approx 0,7$ эВ. Причины неприменимости теории возмущений очевидны.

2. Выбранная нами ВФ основного состояния (14.2) симметрична по отношению к перестановке пространственных переменных $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$. В соответствии с общим требованием антисимметричности полной ВФ эта координатная ВФ соответствует состоянию системы с полным спином $S = 0$ (парасостояние). Система в ортосостоянии — состоянии с $S = 1$ — должна описываться антисимметричной координатной ВФ. Такая ВФ не может быть построена из двух одинаковых орбиталей. Поэтому в качестве исходных функций используем

$$\begin{aligned}\psi_1(r) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right), \\ \psi_2(r) &= \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{2a_0}\right).\end{aligned}\quad (14.10)$$

Функции (14.10) — это ВФ основного и первого возбужденного ($2s$) состояний частицы в кулоновском поле. Из функций ψ_1, ψ_2 могут быть построены как антисимметричная орбиталь ортосостояния

$$\Phi_a = \frac{1}{\sqrt{\pi}} [\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)],$$

так и симметричная орбиталь парасостояния

$$\Phi_s = \frac{1}{\sqrt{\pi}} [\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) + \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)].$$

Вычисление поправки по теории возмущений дает

$$E_s^{(1)} = A + J, \quad E_a^{(1)} = A - J. \quad (14.11)$$

Существенно, что обменный интеграл

$$J = \iint \psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

положителен. Таким образом, ортосостояние лежит ниже парасостояния. Расщепление уровней незначительно. Экспериментальные значения энергии возбужденных состояний суть $E_s = -2,146$; $E_a = -2,175$ (в атомных единицах).

3. Для вычисления низших энергетических уровней атома гелия мы применили прямой вариационный метод. При этом в качестве пробных одночастичных ВФ мы использовали ВФ частицы в кулоновском поле, строя из них функции правильной симметрии. Очевидно, если использовать единственный вариационный параметр — эффективный заряд ζ , то точность такого метода будет ухудшаться с ростом числа электронов.

Расширим класс пробных функций, потребовав выполнения правила симметрии. Простейшая пробная функция для системы из N взаимодействующих фермионов имеет вид

$$\Phi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \text{Det} |\varphi_i(\mathbf{r}_j, \sigma_i)|, \quad (14.12)$$

где индексы i и j принимают значения от 1 до N . Одночастичные функции $\varphi_i(q)$ предполагаются ортонормированными:

$$\int \varphi_i(q_j) \varphi_k(q_j) dq_j = \delta_{ik}.$$

Воспользовавшись совпадением пробной ВФ (14.12) с ВФ коллектива невзаимодействующих фермионов, в этом приближении мы можем говорить о состоянии отдельного электрона. Выражение «электрон в состоянии φ_i » применительно к системе взаимодействующих частиц означает, что функция φ_i входит в детерминант (14.12). Из вариационного принципа следует уравнение

$$\langle \delta\Phi | \hat{H} | \Phi \rangle = 0.$$

Гамильтониан атома \hat{H} в системе, связанной с ядром, имеет вид

$$\hat{H} = \sum_i^N \hat{h}_i + \frac{1}{2} \sum_{i,k}^N \hat{V}_{i,k}. \quad (14.13)$$

Одночастичный гамильтониан \hat{h}_i содержит кинетическую энергию и энергию взаимодействия с ядром i -го электрона:

$$\hat{h}_i = \frac{\hat{p}_i^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_i}.$$

Двухчастичный оператор \hat{V}_{ik} описывает взаимодействие электронов:

$$\hat{V}_{ik} = e^2 / r_{ik}.$$

4. Пусть φ_k — одночастичная ВФ, ортогональная ко всем φ_i при $1 \leq i \leq N$. Иными словами, φ_k есть ВФ одночастичного состояния, не заполненного в конфигурации Φ . Заменяем в детерминанте (14.12) одну из функций φ_i на $\varphi_i + \lambda\varphi_k$, где λ — малый параметр. Полученный таким образом детерминант будет нормирован на единицу в первом

порядке по λ . Такую вариацию $\delta\Phi$ удобно записать в представлении вторичного квантования:

$$|\delta\Phi\rangle = \lambda \widehat{c}_k^+ \widehat{c}_i |\Phi\rangle.$$

Выражение для гамильтониана (14.13) в представлении вторичного квантования, согласно формуле (13.27), имеет вид

$$\widehat{H} = \sum_{il} h_{jl} \widehat{c}_j^+ \widehat{c}_l + \frac{1}{2} \sum_{jj'lv} V_{jj',lv} \widehat{c}_j^+ \widehat{c}_{j'}^+ \widehat{c}_l \widehat{c}_l.$$

Потребуем выполнения условия стационарности в первом порядке по λ :

$$\sum_{jl} \langle \Phi | h_{jl} \widehat{c}_i^+ \widehat{c}_k \widehat{c}_j^+ \widehat{c}_l | \Phi \rangle + \frac{1}{2} \sum_{jj'lv} V_{jj',lv} \langle \Phi | \widehat{c}_i^+ \widehat{c}_k \widehat{c}_j^+ \widehat{c}_{j'}^+ \widehat{c}_l \widehat{c}_l | \Phi \rangle = 0. \quad (14.14)$$

Для преобразования равенства (14.14) используем коммутационные соотношения для операторов \widehat{c} и следующие из определения функции Φ равенства

$$\widehat{c}_i^+ |\Phi\rangle = 0 \quad (i \leq N), \quad \widehat{c}_k |\Phi\rangle = 0 \quad (k \geq N).$$

Матричные элементы в первой сумме (14.14) отличны от нуля, только если $i = l \leq N$, а $j = k > N$, и из всей суммы остается только \widehat{h}_{ki} . Проверяя различные комбинации индексов, которые обеспечивают отличие матричных элементов во втором члене от нуля, приходим к уравнению

$$h_{ki} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N (V_{jk,ji} - V_{jk,ij} - V_{kj,ji} + V_{kj,ij}) = 0.$$

Используя соотношение

$$V_{\alpha\beta, \gamma\delta} = V_{\beta\alpha, \delta\gamma},$$

имеем окончательно уравнение

$$h_{ki} + \sum_{j=1}^N (V_{kj,ij} - V_{kj,ji}) = 0. \quad (14.15)$$

Эти уравнения должны выполняться при всех $k > N$, $i \leq N$.

5. Введем эффективный гамильтониан — одночастичный оператор

$$\widehat{H}' = \sum_{ki} \left[h_{ki} + \sum_{j=1}^N (V_{kj,ij} - V_{kj,ji}) \right] \widehat{c}_k^+ \widehat{c}_i. \quad (14.16)$$

Условия стационарности среднего значения энергии, вычисленного с детерминантной пробной функцией Φ , которые определяются уравнениями (14.15), означают, что матричные элементы \hat{H}' , вычисленные между ВФ одночастичного состояния φ_i , заполненного в Φ , и одночастичного состояния φ_k , не заполненного в Φ , равны нулю.

С помощью некоторого унитарного преобразования можно перейти к представлению, в котором оператор \hat{H}' является диагональным. В силу (14.15) в этом представлении ВФ новых заполненных состояний ψ_i выражаются через линейные комбинации φ_i ($1 \leq i \leq N$), а ВФ новых незаполненных состояний ψ_k выражаются через линейные комбинации φ_k ($k > N$).

Поскольку сумма по j в (14.16) есть след по подпространству заполненных состояний, то определение оператора \hat{H}' инвариантно по отношению к такому преобразованию.

Новое представление определяется соотношениями

$$h_{ki} + \sum_{j=1}^N (V_{kj, ij} - V_{kj, ji}) = \varepsilon_i \delta_{ki}. \quad (14.17)$$

Уравнения (14.17) называются *уравнениями Хартри–Фока*.

Из формулы (14.17) следует, что

$$\varepsilon_i = \langle i|h|i \rangle + \sum_j \left(\langle ij|\hat{V}|ij \rangle - \langle ij|\hat{V}|ji \rangle \right). \quad (14.18)$$

Среднее значение \hat{H} для пробного основного состояния Φ равно

$$\bar{E} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N (h_{ii} + \varepsilon_i).$$

Это выражение можно, используя полученное выше выражение для ε_i , представить в виде

$$\bar{E} = \sum_i \varepsilon_i - \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\langle ij|\hat{V}|ij \rangle - \langle ij|\hat{V}|ji \rangle \right).$$

Энергия, необходимая для удаления из атома i -го электрона, равна разности энергий атома и иона. Если считать, что одночастичные электронные ВФ для атома и иона совпадают (это приближение оправдано при $Z \gg 1$), то разность будет равна среднему значению тех членов в гамильтониане, которые зависят от координат данного электрона. Из (14.18) следует, что эта энергия равна — ε_i .

6. Уравнения (14.17) для одночастичных ВФ $\psi_i(\mathbf{r}, \sigma)$ электронов в атоме имеют вид

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_i(\mathbf{r}, \sigma) - \frac{Ze^2}{r}\psi_i(\mathbf{r}, \sigma) + \\
 & + e^2 \sum_j \sum_{\sigma'} \int \psi_j^*(\mathbf{r}_2, \sigma') \frac{1}{r_{12}} \psi_j(\mathbf{r}_2, \sigma') d\mathbf{r}_2 \psi_i(\mathbf{r}_1, \sigma) - \\
 & - e^2 \sum_j \sum_{\sigma'} \int \psi_j^*(\mathbf{r}_2, \sigma') \frac{1}{r_{12}} \psi_j(\mathbf{r}_1, \sigma) \psi_i(\mathbf{r}, \sigma') d\mathbf{r}_2 = \\
 & = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}, \sigma). \quad (14.19)
 \end{aligned}$$

Каждое из уравнений (14.19) можно рассматривать как УШ для частицы в некотором поле. Выражение

$$\hat{V}_H(\mathbf{r}) = e^2 \sum_j \int |\psi_j(\mathbf{r}_2)|^2 \frac{1}{r_{12}} d\mathbf{r}_2,$$

входящее в третий член в левой части (14.19), называется *самосогласованным полем Хартри*. Его можно интерпретировать как действующее на i -й электрон среднее кулоновское поле, создаваемое всеми электронами. Слагаемое с $i = j$ в четвертом члене компенсирует электростатическое воздействие электрона на самого себя, включенное в самосогласованное поле Хартри. Вообще четвертый член в левой части (14.19) нельзя интерпретировать как локальный потенциал. Его можно представить в виде интегрального оператора

$$\hat{V}_H(\mathbf{r}) = -e^2 \delta(\sigma_i, \sigma_j) \int W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \psi_i(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2$$

с симметричным ядром

$$W(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{r_{12}} \sum_j \varphi_j^*(\mathbf{r}_2) \varphi_j(\mathbf{r}_1),$$

которое мы будем называть *нелокальным потенциалом*.

Для решения системы уравнений Хартри–Фока обычно применяют итерационный метод. В нулевом приближении самосогласованные потенциалы заменяют некоторым потенциалом, одинаковым для всех уравнений (например, потенциалом Томаса–Ферми, см. п. 14.14), и решают соответствующее уравнение Шредингера. Получившиеся ВФ первого приближения используют для получения эффективных потенциалов первого приближения, и т. д.

7. В большом числе случаев хорошим приближением для системы уравнений Хартри–Фока является приближение центрального самосогласованного поля. В этом приближении каждую одночастичную

функцию φ_i , входящую в детерминант (14.12), можно характеризовать определенными значениями квадрата и проекции орбитального момента, т. е. выбрать орбитали в виде

$$\varphi(\mathbf{r}_i) = R_{nl}(r_i) Y_{lm}(\theta_i, \varphi_i). \quad (14.20)$$

Состояния с моментом l обозначаются буквами так же, как и в задаче двух тел (см. гл. 5). Одночастичные функции с заданными l нумеруются в порядке возрастания энергии главным квантовым числом $n = n_r + l + 1$, где n_r — радиальное квантовое число, равное числу узлов соответствующей радиальной функции. Напомним, что для атома водорода значение энергии зависело только от главного квантового числа состояния. Для сложного атома это, понятно, не имеет места. Главное квантовое число указывается цифрой перед буквенным обозначением момента.

Совокупность состояний с заданными n и l мы будем называть *электронной оболочкой*. Такая совокупность содержит $4l + 2$ состояния. Электроны, находящиеся в состояниях с одинаковыми n и l , называются *эквивалентными*. Число эквивалентных электронов указывается в виде верхнего индекса у обозначения оболочки. Так, основное состояние атома гелия обозначается $(1s)^2$; возбужденное состояние, рассмотренное в п. 14.2, есть $(1s)^1(2s)^1$. Распределение электронов по оболочкам называется *электронной конфигурацией*. Оболочка, содержащая $4l + 2$ электрона, называется *заполненной*.

8. Электронные конфигурации атомов в основных состояниях в общих чертах определяются следующим эмпирическим правилом. Заполненными оказываются оболочки с минимальными значениями $n + l$, а из оболочек с равными $n + l$ — оболочки с минимальными значениями n . Заполнение оболочек с ростом Z идет вдоль диагоналей таблицы сверху вниз.

Это правило лучше всего выполняется для легких атомов. Вплоть до значения $Z = 40$ (атом Zr) встречаются только два отклонения от правила. А именно атом Cr ($Z = 24$) вместо конфигурации $(\dots)(4s)^2(3d)^4$ имеет конфигурацию $(\dots)(4s)^1(3d)^5$ и атом Cu ($Z = 29$) вместо конфигурации $(\dots)(4s)^2(3d)^9$ имеет конфигурацию $(\dots)(4s)^1(3d)^{10}$. Отклонения чаще всего встречаются при заполнении оболочек $4d, 4f$.

Приведенное выше правило можно качественно пояснить, рассматривая движение одного электрона в поле ядра, экранированного другими электронами. В состояниях с моментом l асимптотика ВФ при малых r имеет вид r^l . Поэтому в состояниях с меньшими значениями l вероятность малых расстояний от ядра, где экранирующее действие остальных электронов сказывается слабо, относительно велика. Соответствующее значение \bar{E} сказывается ниже, поэтому из оболочек с равными n в первую очередь заполняются оболочки с меньшими l .

Радиальная функция R_{nl} имеет $n - l$ узлов. Поэтому, несмотря на относительно большую вероятность значений r , близких к нулю, среднее расстояние электрона для состояний с большими n оказывается больше из-за осциллирующего характера радиальной функции. Из-за этого энергия связи электрона резко уменьшается при переходе от np -оболочек к $(n + 1)s$ -оболочкам. При дальнейшем увеличении заряда ядра Z и числа электронов ионизационные потенциалы атомов, в общем, монотонно возрастают вплоть до очередного перехода к s -оболочке.

	$n + l$		1	2	3	4
$n \backslash l$	0	1	2	3	4	
1	1s					
2	2s	2p				
3	3s	3p	3d			
4	4s	4p	3d	4f		
5	5s	5p	5d	5f	5g	

Таким характером изменения структуры атомов можно объяснить периодичность химических свойств, лежащую в основе периодической системы элементов Менделеева. Каждому периоду таблицы (кроме первого, состоящего из единственной оболочки 1s) соответствует группа оболочек, начинающаяся ns -оболочкой и заканчивающаяся np -оболочкой.

9. Приближение центрального самосогласованного поля упрощает задачу о вычислении ВФ. Однако самосогласованное поле, вычисленное с помощью ВФ вида (14.20), является центральным только для атомов со всеми заполненными оболочками*. Строго говоря, само понятие об оболочках применимо лишь для атомов, в которых самосогласованное поле центрально. Однако отклонение поля от центрального, как правило, незначительно. Это позволяет использовать ВФ вида (14.20) для произвольных атомов.

Состояние атома с незаполненной оболочкой в приближении центрального поля сильно вырождено. При k электронах в оболочке ($n l$) кратность вырождения

$$g = \frac{(4l + 2)!}{k! (4l + 2 - k)!}$$

Поскольку влияние нецентральности самосогласованного поля мало, то для определения спектра в этом случае можно использовать теорию возмущений для вырожденного уровня. Иначе говоря, для незаполненной оболочки следует использовать пробные ВФ, представляющие собой линейные комбинации детерминантных ВФ, в которых одночастичные орбитали φ_i для электронов в незаполненных оболочках входят с разными значениями m_i и s_i .

Операторы полного орбитального момента \hat{L} и полного спинового момента \hat{S} системы электронов коммутируют с точным гамильтонианом и потому являются интегралами движения. Поэтому состояние атома с заданной конфигурацией можно классифицировать по значениям полного момента L и полного спина S . Очевидно, что суммарные момент и спин заполненных оболочек равны нулю и вклад в L и S дают только электроны незаполненных оболочек.

При учете нецентральности эффективного поля по теории возмущений вырождение частично снимается. Состояния незаполненной оболочки расщепляются на спектральные термы. Разность энергий термов называется энергией остаточного взаимодействия. Для описания состояния атома в этом приближении нужно задать, кроме электронной конфигурации, также значения L и S . Для указания значений L приняты буквенные обозначения:

$$\begin{array}{cccccc} L & = & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ & & S & P & D & F & G & H \end{array}$$

Величина $2S + 1$, называемая *мультиплетностью терма*, указывается в виде верхнего индекса слева от обозначения L . Полный момент J указывается в виде правого нижнего индекса при обозначении терма.

Найдем возможные термы конфигурации $(np)^2$. Существует шесть различных одноэлектронных состояний. Опустив квантовые числа n и $l = 1$, одинаковые для всех одноэлектронных состояний, мы будем указывать величину проекции спина электрона знаками $+$ и $-$, а значения проекции момента будем обозначать цифрами 1, 0, $\bar{1}$. Последний знак означает $m = -1$. С учетом принципа Паули возможны 15 различных размещений двух электронов, а именно

$$\begin{array}{cccccc} |1+1-\rangle, & |1+0-\rangle, & |1+\bar{1}-\rangle, & |\bar{1}+0-\rangle, & |\bar{1}+\bar{1}-\rangle, & \\ & |1+0+\rangle, & |1+\bar{1}+\rangle, & |\bar{1}+0+\rangle, & & \\ & |1-0+\rangle, & |1-\bar{1}+\rangle, & |\bar{1}-0+\rangle, & & \\ & |1-0-\rangle, & |1-\bar{1}-\rangle, & |\bar{1}-0-\rangle, & & \\ & & |0+0-\rangle. & & & \end{array} \quad (14.21)$$

Состояние $|1+1-\rangle$ имеет проекцию полного момента $M = 2$ и мультиплетность $2S + 1 = 1$, поэтому оно принадлежит терму 1D .

Этому же терму должны принадлежать еще четыре состояния с наборами чисел M, S : $(1, 0)$, $(0, 0)$, $(-1, 0)$ и $(-2, 0)$. Соответствующие этим состояниям ВФ будут линейными комбинациями функций, записанных в первой, третьей и пятой строках (14.21). Далее, квантовые числа состояния $|1+0+\rangle$ соответствуют терму 3P . Ему принадлежат девять состояний с квантовыми числами M и S , принимающими любые значения из набора $(+1, 0, -1)$. В (14.21) содержатся три состояния с числами $M = 0, S = 0$. Термам 1D и 3P принадлежит по одной линейной комбинации таких состояний. Оставшаяся линейно независимая комбинация может принадлежать только терму 1S . Итак, для конфигурации $(np)^2$ возможны термы ${}^1D, {}^3P, {}^1S$.

Для энергий термов выполняется эмпирическое *правило Хунда*: наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным значением S и с наибольшим при данном S значением L . В разобранным примере конфигурации $(np)^2$ наименьшей энергией обладает терм 3P . Требование максимальности S можно пояснить на примере системы двух электронов. Спину $S = 1$ соответствует антисимметричная орбиталь, обращающаяся в нуль при $r_1 = r_2$. Поэтому вероятность малых значений r_{12} меньше, чем для случая $S = 0$, меньше и соответствующая энергия электростатического отталкивания.

10. Вычисление энергии термов представляет собой чрезвычайно сложную задачу. Во-первых, нужно решить систему уравнений Хартри–Фока с одночастичными орбиталями φ_i вида (14.19), соответствующими центральному полю. Такое решение, вообще говоря, возможно лишь численными методами. Затем из детерминантных ВФ, в которые для электронов незаполненной оболочки должны быть включены одночастичные ВФ с различными значениями m_i и s_i , должны быть образованы линейные комбинации, которые являются общими СФ операторов $\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$, поскольку \hat{L} и \hat{S} коммутируют с точным гамильтонианом. Такая процедура есть, в сущности, построение правильных ВФ нулевого приближения в теории возмущений для вырожденного случая, рассмотренное в п. 6.4.

Наконец, надо вычислить диагональные матричные элементы точного гамильтониана \hat{H} для состояний, принадлежащих различным термам. Разности энергий \bar{E}_T и определяют расстояние между термами. Вычисление значений E_T значительно упрощается тем обстоятельством, что матричные элементы кулоновского взаимодействия V_{kl} отличны от нуля, только если индексы i и k относятся к электронам в незаполненных оболочках*.

Если считать известными решения уравнений Хартри–Фока для радиальных функций, то можно получить некоторые соотношения для разностей энергий атомных термов. Рассмотрим конфигурацию $(np)^2$, для которой возможны термы ${}^1D, {}^3P$ и 1S . Поправки к значению

энергии, вычисленному в приближении центрального поля, будут определяться величинами.

$$V_{\alpha\beta} = Q_{\alpha\beta} - \delta(s_\alpha, s_\beta) J_{\alpha\beta}, \quad (14.22)$$

где α и β — наборы чисел, определяющих вид орбитальной функции, а Q и J — кулоновский и обменный интегралы соответственно:

$$Q_{\alpha\beta} = \int |\varphi_\alpha(\mathbf{r}_1)|^2 \frac{1}{r_{12}} |\varphi_\beta(\mathbf{r}_1)|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2,$$

$$J_{\alpha\beta} = \int \varphi_\alpha^*(\mathbf{r}_1) \varphi_\beta(\mathbf{r}_1) \frac{1}{r_{12}} \varphi_\beta^*(\mathbf{r}_2) \varphi_\alpha(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2.$$

Состояние $|1+1-\rangle$ есть правильная ВФ, принадлежащая терму 1D . Соответствующее значение энергии можно, используя (14.5), записать в виде

$$E({}^1D) = Q_{11} = \sum_{j,m} \iiint R_1^2(r_1) r_1^2 R_2^2(r_2) r_2^2 \times$$

$$\times |Y_{11}(\theta_1, \varphi_1)|^2 |Y_{11}(\theta_2, \varphi_2)|^2 \frac{4\pi}{r_{>}} \frac{1}{2l+1} \times$$

$$\times \left(\frac{r_{<}}{r_{>}} \right)^l Y_{lm}^*(\theta_1, \varphi_1) Y_{lm}(\theta_2, \varphi_2) dr_1 dr_2 d\Omega_1 d\Omega_2. \quad (14.23)$$

В силу теорем сложения для шаровых функций в формуле (14.23) будут отличны от нуля только угловые интегралы вида

$$\int Y_{lm}^* Y_{l'm'} Y_{j, m-m'} d\Omega \quad (14.24)$$

с индексами, удовлетворяющими соотношениям

$$|l-l'| \leq j \leq l+l', \quad l+l'+j = 2n. \quad (14.25)$$

Поэтому в сумме (14.23) останутся только два слагаемых с $l=0$ и $l=2$:

$$E({}^1D) = a_0(1, 1) F_0 + a_2(1, 1) F_2.$$

Здесь F_0 и F_2 обозначают интегралы по радиальным переменным. Для вычисления a_0 и a_2 используем явный вид сферических функций:

$$a_0 = 4\pi \left[\int |Y_{11}(\theta, \varphi)|^2 Y_{00} d\Omega \right]^2.$$

Учитывая, что $Y_{00} = (4\pi)^{-1/2}$, а функция Y_{11} нормирована, получаем $a_0 = 1$. Аналогично вычисляется и

$$a_2 = \frac{4\pi}{5} \left[\int |Y_{11}(\theta, \varphi)|^2 Y_{20} d\Omega \right]^2.$$

Подставляя явный вид сферических функций

$$|Y_{11}| = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta, \quad Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3 \cos^2 \theta),$$

получаем $a_2 = 1/25$. Итак,

$$Q_{11} = F_0 + \frac{1}{25} F_2 = E(^1D). \quad (14.26)$$

Аналогичные вычисления для состояния $|1+0+\rangle$ — правильного состояния терма 3P — дают

$$E(^3P) = Q_{10} - J_{10} = F_0 - \frac{5}{25} F_2. \quad (14.27)$$

Правильной ВФ, соответствующей терму 1S , в наборе состояний (14.21) нет. Мы не будем находить правильные ВФ, а воспользуемся тем, что различные линейные комбинации функций $|0+0-\rangle$, $|1+\bar{1}-\rangle$, $|\bar{1}+0-\rangle$ принадлежат каждому из трех термов. При унитарном преобразовании, переводящем эти функции в правильные ВФ термов, след оператора \hat{H} остается неизменным. Поэтому можно записать

$$E(^1S) + E(^3P) + E(^1D) = Q_{00} + Q_{11} + Q_{\bar{1}1}.$$

Вычисляя значение

$$Q_{00} = F_0 + \frac{4}{25} F_2$$

и используя выражения (14.26), (14.27), получим

$$E(^1S) = F_0 + \frac{10}{25} F_2. \quad (14.28)$$

Из формул (14.26)–(14.28) можно получить соотношение для разности энергий термов, которое не включает значений радиальных интегралов F_0 и F_2 :

$$\varkappa = \frac{E(^1S) - E(^1D)}{E(^1D) - E(^3P)} = \frac{3}{2}.$$

Экспериментальные значения энергий термов атомов с конфигурациями $(np)^2$ дают следующие значения для отношения \varkappa : $(2p)^2$ — атом С — $\varkappa = 1,13$, $(3p)^2$ — атом Si — $\varkappa = 1,48$, $(4p)^2$ — атом Ge — $\varkappa = 1,50$.

11. Все предыдущие вычисления основывались на использовании гамильтониана (14.13) и полностью игнорировали релятивистские эффекты. В этом приближении полный момент \hat{L} и полный спин \hat{S} являлись интегралами движения и использовались нами в качестве основы для классификации атомных состояний. Среди релятивистских поправок второго порядка по α наибольший интерес

представляет член спин-орбитального взаимодействия

$$\hat{V}_{ls} = \sum_i f(r_i) \hat{l}_i \hat{s}_i = \frac{\hbar^2}{2m^2 c^2} \sum_i \left(\frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \right) \hat{l}_i \hat{s}_i. \quad (14.29)$$

Если влияние спин-орбитального взаимодействия мало по сравнению с влиянием нецентральности, то можно сохранить описание состояния атома с помощью квантовых чисел L и S , а оператор \hat{V}_{ls} рассматривать как малое возмущение.

Вычислим среднее значение энергии спин-орбитального взаимодействия для заданного терма. Учитывая, что операторы \hat{l}_i и \hat{s}_i действуют только на ВФ i -го электрона, можно сразу записать

$$\hat{V}_{ls} = \frac{\hbar^2}{2m^2 c^2} \sum_i W(nl)_i \hat{l}_i \hat{s}_i, \quad (14.30)$$

где $W(nl)$ есть радиальный интеграл спин-орбитального взаимодействия:

$$W(nl) = \int \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial r} R_{nl}^2(r) r^2 dr. \quad (14.31)$$

Здесь через U обозначен эффективный потенциал, который считается центрально-симметричным. Из результата задачи 4.8 следует, что при вычислении матричных элементов оператора \hat{V} , диагональных по L и S , можно заменить \hat{l}_i на $a_i \hat{L}$ и \hat{s}_i на $b_i \hat{S}$, причем константы a_i и b_i зависят только от L и S . Таким образом,

$$\begin{aligned} \langle \hat{V}_{ls} \rangle &= \langle LM' S \mu' | \hat{V}_{ls} | LMS \mu \rangle = \\ &= \frac{\hbar^2}{2m^2 c^2} \left(\sum_i W(nl)_i a_i b_i \right) \langle LM' S \mu' | \hat{L} \hat{S} | LMS \mu \rangle. \end{aligned}$$

Оператор $\hat{L} \hat{S}$ диагонализуется одновременно с операторами \hat{J}^2 , \hat{J}_z , \hat{L}^2 , и \hat{S}^2 , так что

$$2\hat{L} \hat{S} = \hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2.$$

Если незаполнена только одна nl -оболочка, то диагональные матричные элементы равны

$$\langle \hat{V}_{ls} \rangle = \frac{1}{4} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 A [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)],$$

где

$$A = \bar{W}(nl) \sum a_i b_i.$$

Таким образом, при учете спин-орбитального взаимодействия спектральный терм расщепляется на группу уровней. Расстояние между

соседними двумя уровнями зависит для заданного терма только от L :

$$\Delta E_{J, J-1} = A' J. \quad (14.32)$$

Соотношение (14.32) называется *правилом интервалов Ланде*. Уровни, на которые расщепляется атомный терм при учета спин-орбитального взаимодействия, называется *компонентами тонкой структуры* атомных уровней.

Рассмотренное выше приближение, в котором в качестве невозмущенных рассматривались состояния атома с заданными L и S , пригодно, только если интервалы тонкой структуры малы по сравнению с расстоянием между термами. Такой случай называют *случаем Рассела–Саундерса* или LS -типом связи. Практически такое приближение хорошо описывает энергетические спектры легких атомов.

По мере увеличения заряда ядра роль релятивистских эффектов возрастает. Если спин-орбитальное взаимодействие значительно превышает энергию остаточного взаимодействия, то лучшие результаты получаются, если в качестве ВФ отдельных электронов использовать общие ВФ операторов \hat{j}_i^2 , \hat{j}_{zi} , \hat{l}_i^2 , \hat{s}_i^2 . При этом оболочка (np) распадается на подоболочки ($n, l, j = l + 1/2$) и ($n, l, j = l - 1/2$). Учет нецентрального электростатического взаимодействия приводит к расщеплению подоболочек на уровни с различными значениями полного момента J . В этом случае

$$\sum_i \mathbf{j}_i = \mathbf{J}. \quad (14.33)$$

Такую схему описания состояния атома называют jj -связью. В чистом виде этот тип связи не проявляется даже для самых тяжелых атомов: для них реализуются случаи, промежуточные между LS - и jj -типами.

12. Рассмотрим влияние магнитного поля на положение атомных уровней энергии. Гамильтониан атома во внешнем поле имеет, при учете релятивистских поправок, следующий вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \sum_i \left(\hat{\mathbf{p}}_i - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - \sum_i \frac{Ze^2}{r_i} + \frac{1}{2} \sum_{ik} \frac{e^2}{r_{ik}} - \frac{\hbar e}{mc} \mathcal{H} \sum_i \hat{\mathbf{s}}_i. \quad (14.34)$$

Обозначим через \hat{H}_a гамильтониан атома в отсутствие поля. Тогда (14.34) можно переписать в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_a - \frac{e}{mc} \sum_i \mathbf{A}_i \hat{\mathbf{p}}_i + \frac{e^2}{2mc^2} \sum_i \mathbf{A}_i^2 - \frac{e\hbar}{mc} \mathcal{H} \hat{\mathbf{S}}.$$

Выбрав вектор-потенциал однородного магнитного поля в форме

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathcal{H} \mathbf{r}],$$

получим

$$\hat{H} = \hat{H}_a - \frac{e}{2mc} \mathcal{H} \sum_i [\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i] + \frac{e^2}{8mc^2} \sum_i [\mathcal{H} \mathbf{r}_i]^2 - \frac{e\hbar}{mc} \mathcal{H} S.$$

Векторное произведение во втором члене после симметризации есть оператор орбитального момента электрона $\hat{\mathbf{l}}_i$. В случае LS -связи гамильтониан приобретает вид

$$\hat{H} = \hat{H}_a - \mu_0 (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \mathcal{H} + \frac{e^2}{8mc^2} \sum_i [\mathcal{H} \mathbf{r}_i]^2. \quad (14.35)$$

Если поле достаточно слабо и величины сдвигов уровней малы по сравнению с расстоянием между компонентами тонкой структуры, то состояние атома можно описывать набором квантовых чисел J , M_i , L и S , а второй и третий члены в правой части (14.35) рассматривать как возмущение. При малых \mathcal{H} доминирует второй член. Диагональные элементы оператора

$$\hat{V}_m = -\mu_0 (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \mathcal{H}$$

можно вычислить, представив его в виде

$$\hat{V}_m = -\mu_0 \mathcal{H} (\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}}) = -\mu_0 \mathcal{H} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{J}}, \quad (14.36)$$

где скалярный оператор $\hat{\mathbf{A}}$ можно определить, домножив обе части равенства (14.36) на $\hat{\mathbf{J}}$:

$$\hat{\mathbf{A}} = 1 + \frac{\hat{\mathbf{J}} \hat{\mathbf{S}}}{\hat{J}^2}.$$

Учитывая, что оператор $\hat{\mathbf{J}} \hat{\mathbf{S}}$ диагонален в JML -представлении, для диагональных матричных элементов, определяющих сдвиг уровней, получим

$$\Delta E^{(1)} = -\mu_0 \mathcal{H} g M, \quad (14.37)$$

где M — значение проекции полного момента на направление магнитного поля, а безразмерная величина

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (14.38)$$

называется *множителем Ланде*. Расщепление атомных термов в магнитном поле, определяемое формулой (14.37), носит название *эффекта Зеемана*. Эффект называется нормальным для синглетных термов, когда $g = 1$.

Если расщепление уровней в магнитном поле велико по сравнению с интервалами тонкой структуры, то зеемановский член в гамильтониане более существен, чем спин-орбитальный, и сдвиг уровней в магнитном поле следует вычислять в представлении

LM_LSM_S . Напомним, что представление LM_LSM_S было введено нами в п. 14.8 для диагонализации оператора спин-орбитального взаимодействия. Поскольку в LM_LSM_S -представлении проекции орбитального M_L и спинового M_S моментов на направление поля сохраняются, то диагональные матричные элементы оператора \hat{V}_m вычисляются элементарно:

$$\Delta E^{(1)} = -\mu_0 \mathcal{H} (M_L + 2M_S). \quad (14.39)$$

Спектральный терм расщепляется на $2L + 3$ равноотстоящих компоненты. Сдвиг атомных уровней в сильном магнитном поле, определяемый формулой (14.39), носит название *эффекта Пашена–Бака*. Для магнитных полей промежуточной величины секулярное уравнение для энергии надо решать точно.

13. Если электронная конфигурация атома не содержит незаполненных оболочек, то атом при этом не обладает ни спином, ни орбитальным моментом (если, как и всюду выше, отвлечься от спина ядра). В этом случае второй член в формуле (14.35) не приводит к расщеплению термов ни в одном порядке теории возмущений. Для таких конфигураций эффект воздействия магнитного поля полностью определяется третьим членом в (14.35):

$$E^{(1)} = \frac{e^2}{8mc^2} \sum_i \overline{[\mathcal{H} \mathbf{r}_i]^2}. \quad (14.40)$$

Волновая функция в состоянии с $L = 0$, $S = 0$ сферически-симметрична. Представив каждый член в сумме (14.40) в виде

$$[\mathcal{H} \mathbf{r}_i]^2 = \mathcal{H}^2 r_i^2 \sin^2 \theta$$

и усредняя по направлениям \mathbf{r}_i , получим

$$E^{(1)} = \frac{e^2}{12mc^2} \mathcal{H}^2 \sum_i \overline{r_i^2}. \quad (14.41)$$

Таким образом, энергия атома с заполненными оболочками в магнитном поле \mathcal{H} выше, чем в его отсутствие: такой атом диамагнетен. Магнитный момент атома, приобретаемый им в поле \mathcal{H} , имеет величину

$$-\frac{\partial E^{(1)}}{\partial \mathcal{H}} = -\chi \mathcal{H} = \left(-\frac{e^2}{6mc^2} \sum_i \overline{r_i^2} \right) \mathcal{H}. \quad (14.42)$$

Величину χ следует рассматривать как магнитную восприимчивость атома.

Отметим, что формула (14.41) для квадратичного эффекта Зеемана получена в первом порядке теории возмущений, а квадратичный эффект Штарка появляется во втором порядке теории возмущений и

приводит к понижению уровней энергии (поляризуемость атома всегда положительна). Аналогично, к понижению энергии термина основного состояния приведет и квадратичный по полю \mathcal{H} член второго порядка по возмущению \hat{V}_m в случае $L \neq 0$, $S \neq 0$. Поэтому атомы с незаполненными оболочками могут быть и парамагнитны.

14. Для определения самосогласованного поля в тяжелых атомах воспользуемся методом ВКБ. Потенциал эффективного поля $U(\mathbf{r})$ можно связать с плотностью электронов $\rho(\mathbf{r})$ электростатическим уравнением Пуассона

$$\Delta U(\mathbf{r}) = -4\pi\rho(\mathbf{r}). \quad (14.43)$$

В этом пункте мы будем использовать атомные единицы. Считая самосогласованное поле $U(r)$ центральным, что оправдано для тяжелых атомов, так как большая часть электронов в них находится в заполненных оболочках, мы можем представить одноэлектронные ВФ в виде

$$\Psi_{nlm} = \frac{\chi_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

где функция $\chi_{nl}(r)$ удовлетворяет радиальному уравнению

$$\chi'' + 2 \left[E - U(r) - \frac{l(l+1)}{2r^2} \right] \chi = 0.$$

Электронная плотность определится суммированием плотностей электронов, определяемых одночастичными ВФ:

$$\rho(r) = -2 \sum_{nlm} \frac{\chi_{nl}^2}{r^2} |Y_{lm}|^2. \quad (14.44)$$

Здесь двойка перед суммой учитывает наличие двух возможных значений проекции спина электрона. Для суммирования по m в (14.44) используем известное тождество

$$\sum_{m=-l}^l |Y_{lm}|^2 = \frac{2l+1}{4\pi}. \quad (14.45)$$

В результате получаем

$$\rho(r) = -2 \sum_{nl} \frac{\chi_{nl}^2}{r^2} \frac{2l+1}{4\pi}. \quad (14.46)$$

В квазиклассическом приближении в области между действительными точками поворота радиальная ВФ имеет вид

$$\chi_{nl}(r) = \frac{A_{nl}}{\sqrt{p_{nl}}} \cos \left(\int_{r_1}^r p_{nl} dr - \frac{\pi}{4} \right), \quad (14.47)$$

где p_{nl} — классическое выражение для импульса частицы:

$$\frac{p_{nl}^2}{2} = E_{nl} - U(r) - \frac{\lambda^2}{2r^2} \quad \left(\lambda = l + \frac{1}{2} \right). \quad (14.48)$$

Нормировочная постоянная A_{nl} связана с энергетическим спектром приближенным равенством (см. п. 7.4)

$$A_{nl}^2 \approx \frac{2}{\pi} \frac{\partial E_{nl}}{\partial n}. \quad (14.49)$$

Подставляя соотношения (14.47)–(14.49) в формулу (14.46) и заменяя квадрат косинуса его усредненным значением (что оправдано лишь при больших n), получаем

$$\rho(r) = -\frac{1}{2\pi^2} \sum_{nl} \frac{\partial E_{nl}}{\partial n} \frac{2l+1}{r^2} \frac{1}{p_{nl}}. \quad (14.50)$$

Предполагая, что большая часть электронов находится в состояниях с большими значениями квантовых чисел n и l , заменим суммирование по n и l интегрированием:

$$\rho(r) = -\frac{1}{2\pi^2} \int_{l_0}^{l_1} dl \frac{2l+1}{r^2} \int_{n_0}^{n_1} \frac{\partial E_{nl}}{\partial n} \frac{1}{p_{nl}} dn.$$

Рассмотрим внутренний интеграл. Интегрирование по dn переходит в интегрирование по dE :

$$\int_{n_0}^{n_1} \frac{\partial E_{nl}}{\partial n} \frac{1}{p_{nl}} dn = \int_{E_0}^{E_1} \frac{dE}{\sqrt{2(E - V(r))}} = \sqrt{2(E - V(r))} \Big|_{E_0}^{E_1}.$$

Интегрирование по dE ведется от действительной точки поворота $E_0 = V(r)$ до границы дискретного спектра E_1 . Через $V(r)$ обозначен эффективный потенциал. Подставляя пределы интегрирования, приходим к соотношению

$$\rho(r) = -\frac{1}{2\pi^2} \int_{l_0}^{l_1} \frac{2l+1}{r^2} \sqrt{-2V_l(r)} dl. \quad (14.51)$$

Интегрирование по dl выполняется с учетом равенств

$$\frac{\partial V_l}{\partial l} = \frac{\partial}{\partial l} \left[U(r) + \frac{(l + 1/2)^2}{2r^2} \right] = \frac{2l+1}{2r^2}.$$

Таким образом, интегрирование по dl переходит в интегрирование

по dV :

$$\rho(r) = -\frac{1}{\pi^2} \int_{l_0}^{l_1} \frac{\partial V}{\partial l} \sqrt{-2V} dl = -\frac{1}{\pi^2} \int_{V(l_0)}^{V(l_1)} \sqrt{-2V} dV. \quad (14.52)$$

Интегрирование ведется в пределах от $l = 0$ (соответствующее значение эффективного потенциала $V_0 = U(r) - (8r^2)^{-1}$) до максимального значения l_1 , при котором эффективный потенциал меняет знак (ср. п. 5.4):

$$V_{l_1}(r) = 0.$$

Выполняя интегрирование в (14.52), подставляя пределы и пренебрегая центробежным потенциалом в случае $l = 0$, получим

$$\rho(r) = \frac{1}{3\pi^2} [-2U(r)]^{3/2}.$$

Используя уравнение Пуассона, приходим к равенству

$$\Delta\varphi(r) = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \varphi(r)^{3/2}. \quad (14.53)$$

Здесь введено обозначение $\varphi(r) = -U(r)$. Уравнение (14.53) называется *уравнением Томаса–Ферми*.

Граничные условия для функции φ определяются требованиями

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \varphi(r) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow 0} \frac{r\varphi(r)}{Z} = 1. \quad (14.54)$$

Первое из этих условий очевидно, а второе следует из того, что на малых расстояниях от ядра экранировка становится несущественной и эффективный потенциал в основном определяется взаимодействием электронов с ядром. Вводя новую функцию

$$\Phi(r) = r\varphi(r) Z^{-1},$$

получим для нее уравнение

$$\frac{Z}{r} \Phi'' = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \frac{Z^{3/2}}{r^{3/2}} \Phi^{3/2}. \quad (14.55)$$

Вводя безразмерную переменную

$$x = \left(\frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \right)^{2/3} Z^{1/3} r,$$

преобразуем уравнение (14.55) к виду

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = \frac{1}{\sqrt{x}} \Phi^{3/2}. \quad (14.56)$$

Уравнение (14.56) уже не содержит констант, относящихся к данному атому, и определяет некоторую универсальную функцию $\Phi(x)$, удовлетворяющую условиям

$$\Phi(0) = 1, \quad \Phi(\infty) = 0. \quad (14.57)$$

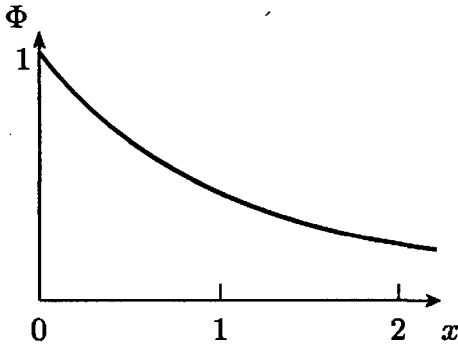


Рис. 43

15. Решение уравнения Томаса–Ферми с граничными условиями (14.57) может быть найдено численными методами. Оно показано на рис. 43. Получим приближенное решение этого уравнения, впервые найденное Зоммерфельдом. Асимптотику $\Phi(x)$ при $x \rightarrow \infty$ выберем в виде

$$\Phi \approx Ax^{-n}.$$

Подстановка этого решения в формулу (14.56) дает

$$An(n+1)x^{-n-2} = A^{3/2}x^{-3n/2-1/2}.$$

Приравнивая показатели степени и числовые коэффициенты, получаем

$$n = 3, \quad A^{1/2} = n(n+1) = 12. \quad (14.58)$$

Таким образом, уравнение (14.56) имеет точное решение $\Phi_0(x) = 144x^{-3}$, которое не удовлетворяет, однако, граничному условию в нуле. Решение, удовлетворяющее такому условию, будет при больших x иметь вид

$$\Phi_1(x) \approx \Phi_0(x) + \psi(x).$$

Считая функцию $\psi(x)$ малой по сравнению с $\Phi_0(x)$ в области больших x , можно подставить решение $\Phi_1(x)$ в уравнение Томаса–Ферми и сохранить лишь линейные по ψ члены. Тогда получим уравнение

$$\psi'' = \frac{1}{\sqrt{x}} \frac{3}{2} \Phi_0^{1/2} \psi = \frac{18}{x^2} \psi. \quad (14.59)$$

Очевидно, уравнение (14.59) имеет решение, убывающее степенным образом:

$$\psi = \frac{B}{x^\nu}, \quad \nu = \frac{-1 + \sqrt{73}}{2} \approx 3,77,$$

с показателем степени ν большим, чем $n = 3$. Это оправдывает сохранение в (14.59) лишь линейных по ψ членов. Итак, при больших x

$$\Phi_1(x) \approx 144x^{-3} + Bx^{-\nu}. \quad (14.60)$$

Решение с асимптотикой (14.60) может быть выбрано в виде

$$\Phi_1(x) = \frac{144}{x^3 (1 + \beta x^{3-\nu})^\alpha},$$

где α, β — константы. Потребуем выполнения граничных условий. Тогда из требования конечности величины $\Phi(0)$ следует:

$$3 - \alpha(v - 3) = 0,$$

$$\alpha = \frac{3}{v - 3} \approx 3,90.$$

Константа β определится из условия $\Phi(0) = 1$:

$$\beta^2 = 144.$$

Итак, окончательный вид приближенного решения есть

$$\Phi(x) = \left[1 + \left(\frac{x}{12^{2/3}} \right)^{3/\alpha} \right]^{-\alpha}.$$

Такое выражение удовлетворительно согласуется с численным решением, давая несколько меньшие значения $\Phi(x)$.

Отметим, что в описании атома с помощью уравнения Томаса–Ферми детали спектров, связанные с оболочечной структурой, оказываются утраченными. Кроме того, существенным недостатком решения $\Phi(x)$ является степенной характер убывания электронной плотности на больших расстояниях вместо экспоненциального. Поэтому решение $\Phi(x)$ приводит к завышенным значениям таких величин как \bar{r}_i или \bar{r}_i^2 ; в частности, его нельзя применять для оценки магнитной восприимчивости χ .

ЗАДАЧИ

1. Определим функцию распределения расстояния между электронами в атоме гелия соотношением

$$\int_A^B \theta(r_{12}) dr_{12} = \iint_{A < r_{12} < B} \Phi_0^2(r_1, r_2) dr_1 dr_2.$$

Найти функцию $\theta(r_{12})$ для основного состояния с ВФ (14.2).

2. Вычислить кулоновский и обменный интегралы для атома гелия в состоянии с одноэлектронными ВФ (14.10). Найти E_s и E_t .

3. Оценить потенциал ионизации отрицательного иона водорода, используя пробную функцию

$$\Phi(\alpha, \beta) = e^{-\alpha r_1 - \beta r_2} + e^{-\beta r_1 - \alpha r_2}.$$

4. Показать, что термы конфигураций $(nl)^k$ и $(nl)^{4l+2-k}$ совпадают.

5. Найти возможные термы для конфигураций $(ns, n's)$, $(ns, n'p)$, $(ns, n'd)$, $(np, n'p)$.

6. Найти возможные термы для конфигураций с одной незаполненной оболочкой $(np)^3$, $(nd)^2$, $(nd)^3$, $(nd)^4$, $(nd)^5$, $(nf)^2$.

7. Используя правило Хунда, найти термы основных состояний для электронных конфигураций, рассмотренных в задаче 14.6.

8. Показать, что для конфигурации $(nl)^k$ при $k \leq 2l + 1$ терм с наибольшим значением L будет синглетом при четном k и дублетом при нечетном k . Найти соответствующие значения L .

9. Построить общие СФ операторов $\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$ для конфигурации $(np)^3$.

10. Конфигурация $(nd)^3$ обладает двумя термами 2D . Найти ВФ для каждого из этих термов.

11. Найти для конфигурации $(np)^3$ отношение

$$\alpha = \frac{E({}^2P) - E({}^2D)}{E({}^2D) - E({}^4S)}.$$

12. Найти для конфигурации $(nd)^2$ отношение

$$\alpha = \frac{E({}^3P) - E({}^3F)}{E({}^1G) - E({}^1D)}.$$

13. Найти пределы изменения множителя Ланде g при заданных значениях L и S .

14. Найти терм конфигурации $(nd)^5$, для которого отсутствует линейный эффект Зеемана.

15. Вычислить диамагнитную восприимчивость гелия.

16. Найти расщепление уровней энергии атома водорода во внешнем однородном магнитном поле, если величина расщепления сравнима с интервалами тонкой структуры.

17. Оценить в модели Томаса–Ферми число заполненных s -оболочек для атома с зарядом ядра Z .

18. Используя метод, рассмотренный в п. 5.4, найти значения Z , при которых в атоме начинают заполняться оболочки $l + 1, l$.

ДВУХАТОМНАЯ МОЛЕКУЛА

1. Если пренебречь различием между центром масс молекулы и центром масс ядер и считать, что центр масс закреплен в начале координат, то уравнение Шредингера для двухатомной молекулы будет иметь вид

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) - \right. \\ \left. - \frac{\hbar^2}{2M\rho^2} \left[\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] + \right. \\ \left. + V(x_i, y_i, z_i; \rho, \theta, \varphi) \right\} \psi(x_i, y_i, z_i; \rho, \theta, \varphi) = E\psi. \quad (15.1)$$

Здесь x_i, y_i, z_i — координаты i -го электрона относительно неподвижной системы координат Σ , углы θ и φ определяют положение в пространстве прямой, соединяющей ядра, ρ — расстояние между ядрами, а M — приведенная масса двух ядер.

В системе координат Σ потенциальная энергия электростатического взаимодействия \hat{V} зависит от θ и φ . Перейдем в систему координат Σ' , вращающуюся вместе с ядрами. Координаты электронов в новой системе будем обозначать прежними буквами x_i, y_i, z_i . Ось Oz системы Σ' направим вдоль прямой, соединяющей ядра, а ось Ox расположим в плоскости $(Oxy)_{\Sigma}$. Новая система Σ' получена из Σ путем последовательных поворотов на углы Эйлера $\varphi + \pi/2, \theta, 0$. Поэтому

$$\psi'(x_i, y_i, z_i) = \hat{U}\psi(x_i, y_i, z_i), \quad (15.2) \\ \hat{U} = e^{i\hat{L}_x\theta} e^{iL_z(\varphi+\pi/2)}.$$

Операторы $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ имеют одну и ту же структуру относительно переменных x_i, y_i, z_i в системах Σ и Σ' . Рассмотрим изменение гамильтониана при унитарном преобразовании (15.2). Первый член — сумма лапласианов в пространстве электронных координат — остается неизменным. Для преобразования второго члена заметим, что

$$e^{i\hat{L}_x\theta} e^{iL_z(\varphi+\pi/2)} \frac{\partial}{\partial \varphi} e^{-iL_z(\varphi+\pi/2)} e^{-i\hat{L}_x\theta} \psi' = \\ = \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - ie^{i\hat{L}_x\theta} \hat{L}_z e^{-i\hat{L}_x\theta} \right) \psi'.$$

Так как

$$e^{i\hat{L}_x\theta}\hat{L}_ze^{-i\hat{L}_x\theta} = \hat{L}_z \cos \theta + \hat{L}_y \sin \theta,$$

то

$$\hat{U} \frac{\partial}{\partial \varphi} \hat{U}^+ = \frac{\partial}{\partial \varphi} - i \left(\hat{L}_z \cos \theta + \hat{L}_y \sin \theta \right). \quad (15.3)$$

Аналогично получаем

$$\hat{U} \frac{\partial}{\partial \theta} \hat{U}^+ = \frac{\partial}{\partial \theta} - i\hat{L}_x. \quad (15.4)$$

Таким образом, в системе Σ' гамильтониан двухатомной молекулы имеет вид (в атомных единицах)

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\frac{1}{2} \sum_i \Delta_i - \frac{1}{2M\rho^2} \left[\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \text{ctg} \theta \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i\hat{L}_x \right) \right] + \\ & + \left(\frac{\partial}{\partial \theta} - i\hat{L}_x \right)^2 + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \sin \theta \cdot \hat{L}_y - i \cos \theta \cdot \hat{L}_z \right) + \hat{V}. \end{aligned} \quad (15.5)$$

Потенциальная энергия в новой системе координат будет иметь вид

$$\hat{V} = \frac{Z_1 Z_2}{\rho} + \sum_{i>k} \frac{1}{r_{ik}} - \sum_{k=1}^n \frac{Z_1}{r_{1k}} - \sum_{k=1}^n \frac{Z_2}{r_{2k}}.$$

Здесь r_{ik} — расстояние между i -м и k -м электронами:

$$r_{ik} = \sqrt{(x_i - x_k)^2 + (y_i - y_k)^2 + (z_i - z_k)^2},$$

r_{1k} — расстояние от k -го электрона до первого ядра:

$$r_{1k} = \sqrt{x_k^2 + y_k^2 + \left(z_k + \rho \frac{M_2}{M_1 + M_2} \right)^2},$$

r_{2k} — расстояние от k -го электрона до второго ядра:

$$r_{2k} = \sqrt{x_k^2 + y_k^2 + \left(z_k - \rho \frac{M_1}{M_1 + M_2} \right)^2}.$$

Таким образом, потенциальная энергия V в системе Σ' не зависит от углов θ и φ . Вышеприведенные формулы не учитывали зависимости ВФ от спиновых переменных. Если спиновые состояния электронов описывать в системе Σ' , то в формуле (15.5) следует заменить \hat{L}_i на $(\hat{L}_i + \hat{S}_i)$.

2. Величина M^{-1} , входящая в коэффициент при втором члене в гамильтониане (15.5), есть отношение массы электрона к приведенной массе ядер и представляет собой малый безразмерный параметр. В первом приближении мы можем пренебречь вторым членом и рассматривать задачу с гамильтонианом

$$\hat{H}_e = -\frac{1}{2} \sum_i \Delta_i + V(r_i, \rho). \quad (15.6)$$

ВФ молекулы можно представить в виде

$$\Psi = \psi_e(x_i, y_i, z_i; \sigma_i; \rho) \varphi_n(\rho, \theta, \varphi), \quad (15.7)$$

где зависящие от параметра ρ электронные ВФ суть СФ гамильтониана (15.6). Соответствующие им собственные значения $E_n(\rho)$ — энергии электронов как функции расстояния ρ между неподвижными ядрами — называются *электронными термами*. Преобразование, сделанное в п. 15.1, и малость параметра M^{-1} позволяют исключить зависимость электронной ВФ ψ_e от углов θ и φ .

3. Полный момент молекулы \hat{K} в неподвижной системе Σ определяется выражением

$$\hat{K} = [\rho p]_s + \sum_i [r_i, p_i]_s, \quad (15.8)$$

где p — импульс относительного движения ядер, а индекс s означает симметризацию в соответствии с правилом п. 2.1. Компоненты момента в системе Σ имеют вид

$$\hat{K}^+ = \hat{L}^+ + e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (15.9)$$

$$\hat{K}^- = \hat{L}^- + e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \quad (15.10)$$

$$\hat{K}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \hat{L}_z. \quad (15.11)$$

Перейдем в систему Σ' ; при таком переходе

$$\hat{K}' = \hat{U} \hat{K} \hat{U}^+,$$

где унитарный оператор \hat{U} определен формулой (15.2). Рассмотрим преобразование компонент \hat{L}_i . Положим $\varphi' = \varphi + \pi/2$:

$$\begin{aligned} e^{i\hat{L}_x\theta} e^{i\hat{L}_z\varphi'} \hat{L}_x e^{-i\hat{L}_z\varphi'} e^{-i\hat{L}_x\theta} = \\ = \hat{L}_x \cos \varphi - \left(\hat{L}_y \cos \theta - \hat{L}_z \sin \theta \right) \sin \varphi, \end{aligned} \quad (15.12)$$

$$e^{i\hat{L}_x\theta} e^{i\hat{L}_z\varphi} \hat{L}_y e^{-i\hat{L}_z\varphi} e^{-i\hat{L}_x\theta} = \hat{L}_x \sin \varphi + \left(\hat{L}_y \cos \theta - \hat{L}_z \sin \theta \right) \cos \varphi. \quad (15.13)$$

Итак,

$$\hat{U}\hat{L}^+\hat{U}^+ = i\hat{L}_x e^{i\varphi} - \left(\hat{L}_y \cos \theta - \hat{L}_z \sin \theta \right) e^{i\varphi}.$$

Аналогично преобразуется и выражение для z -компоненты электронного момента \hat{L}_z :

$$\hat{U}\hat{L}_z\hat{U}^+ = \hat{L}_z \cos \theta - \hat{L}_y \sin \theta.$$

Учитывая соотношения (15.3) и (15.4), для компонент оператора полного момента находим в системе Σ'

$$\hat{K}^+ = e^{i\varphi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \frac{e^{i\varphi}}{\sin \theta} \hat{L}_z, \quad (15.14)$$

$$\hat{K}^- = e^{-i\varphi} \left(-\frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + \frac{e^{-i\varphi}}{\sin \theta} \hat{L}_z, \quad (15.15)$$

$$\hat{K}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (15.16)$$

Оператор \hat{L}_z в этих формулах действует на переменные в системе Σ' . Выражение для квадрата полного момента молекулы имеет вид

$$\hat{K} = - \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i \hat{L}_z \cos \theta \right)^2 \right\} + \hat{L}_z^2. \quad (15.17)$$

4. Вернемся теперь к рассмотрению УШ с гамильтонианом (15.5). Пусть известны решения задачи с неподвижными ядрами, т. е. определены электронные термы $E_e(\rho)$ и электронные ВФ $\psi_e(r_i; \sigma_i; \rho)$. Умножим УШ

$$\hat{H}\psi_e \cdot \psi_n(\rho, \theta, \varphi) = E\psi_e \cdot \psi_n(\rho, \theta, \varphi)$$

на ψ_e^* слева, проинтегрируем по координатам электронов и просуммируем по спиновым переменным. Положим, что в состоянии ψ_e проекция полного (орбитального и спинового момента) электронного момента на ось, соединяющую ядра, равна Λ . Тогда

$$\langle \psi_e | L_x | \psi_e \rangle = \langle \psi_e | L_y | \psi_e \rangle = 0.$$

ВФ ядер можно представить в виде

$$\psi_n(\rho, \theta, \varphi) = f(\rho) \Theta(\theta, \varphi).$$

Разделяя переменные, приходим к уравнениям

$$\left[B \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - E_e(\rho) - U(\rho) - E_{\text{rot}} + E \right] f(\rho) = 0, \quad (15.18)$$

$$B \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \varphi} - i\Lambda \cos \theta \right)^2 \right] \Theta(\theta, \varphi) + E_{\text{rot}} \Theta(\theta, \varphi) = 0. \quad (15.19)$$

Здесь введены обозначения:

$$B = \frac{1}{2M\rho^2}, \quad (15.20)$$

$$U(\rho) = \frac{1}{M} \langle \psi_e | \frac{\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2}{\rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} | \psi_e \rangle. \quad (15.21)$$

Из формулы (15.17) видно, что оператор в левой части (15.19) есть

$$\Lambda^2 - \hat{K}^2. \quad (15.22)$$

Поскольку полный момент \hat{K} является сохраняющейся величиной, в стационарных состояниях оператор можно заменить его собственным значением. Итак,

$$E_{\text{rot}} = B(\rho) \{ K(K+1) - \Lambda^2 \}.$$

Радиальное уравнение (15.18) принимает вид

$$\left\{ B \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - E_e(\rho) - U(\rho) - B(\rho) [K(K+1) - \Lambda^2] + E \right\} f(\rho) = 0. \quad (15.23)$$

Удобно объединить члены, зависящие лишь от электронного состояния молекулы, обозначив

$$W(\rho) = E_e(\rho) + U(\rho) - \Lambda^2 B(\rho).$$

Тогда уравнение (15.23) примет вид

$$\left[B \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - W(\rho) - BK(K+1) + E \right] f(\rho) = 0. \quad (15.24)$$

Решение этого уравнения и определяет энергетический спектр молекулы.

5. Определение электронных термов $E_e(\rho)$ и последующее решение уравнения (15.23) представляет собой сложную задачу. Свойства низколежащих возбужденных уровней можно приближенно описать, воспользовавшись малостью параметра M^{-1} . Для

электронных термов

$$\xi^2 \sim \frac{1}{M} \ll 1,$$

поэтому число дискретных значений E_n велико. Для описания низколежащих возбужденных уровней можно заменить потенциал $W(\rho)$ в окрестности минимума ρ_0 потенциалом гармонического осциллятора

$$W(\rho) \approx W(\rho_0) + \frac{\omega^2}{2} (\rho - \rho_0)^2. \quad (15.25)$$

Волновые функции $f(\rho)$ будут локализованы вблизи ρ_0 . Поэтому в первом приближении в (15.23) можно положить

$$B(\rho) = B(\rho_0) = \frac{\hbar^2}{2M\rho_0^2} = B. \quad (15.26)$$

Величина B называется ротационной постоянной. Тогда

$$E_n \approx W(\rho_0) + BK(K+1) + \omega \left(v + \frac{1}{2} \right),$$

где число v , нумерующее СЗ энергии при постоянном K , называется *колебательным квантовым числом*.

В первом приближении энергии, обусловленные электронным состоянием молекулы, ее вращательным состоянием и ее колебательным состоянием, складываются независимо. Поскольку в атомных единицах

$$W(\rho_0) \sim 1, \quad \omega \sim \xi, \quad B \sim \xi^2,$$

то колебательные уровни представляют собой малые поправки к электронным термам, а вращательные уровни представляют собой малые поправки к колебательным уровням. В следующих приближениях разделение энергии на колебательную и вращательную части уже невозможно.

6. Рассмотрим электронные термы молекулы водорода — системы из двух протонов и двух электронов. Гамильтониан системы при неподвижных ядрах запишем в виде

$$\hat{H}_0 = -\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 + \frac{1}{r_{a1}} + \frac{1}{r_{1b}} - \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{2a}} + \frac{1}{r_{2b}} - \frac{1}{r_{ab}}. \quad (15.27)$$

УШ с гамильтонианом (15.27) не допускает точного решения. Приближенные выражения для электронных термов можно получать, рассматривая часть членов, описывающих потенциальную энергию, как возмущение. Эти члены можно выделить различными способами. Лучшие результаты получаются, если выбрать ВФ нулевого приближения в виде линейных комбинаций ВФ атома водорода, представив

гамильтониан в виде

$$\hat{H}_0 = \left(-\frac{1}{2}\Delta_1 + \frac{1}{r_{1a}}\right) + \left(-\frac{1}{2}\Delta_2 + \frac{1}{r_{2b}}\right) + \hat{V} = \hat{H}_1^0 + \hat{H}_2^0 + \hat{V},$$

$$\hat{V} = -\frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{1b}} + \frac{1}{r_{2a}} - \frac{1}{r_{ab}}.$$

Такое приближение называется *методом Гайтлера–Лондона*. Заметим, что оператор \hat{V} можно рассматривать как возмущение только при $r_{ab} \gg a_0$. Двум возможным спиновым состояниям электронов соответствуют ВФ

$$\varphi_s = v [\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) + \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)] \quad (S = 0), \quad (15.28)$$

$$\varphi_t = v [\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)] \quad (S = 1), \quad (15.29)$$

где нормировочная постоянная

$$v = \frac{1}{\sqrt{2(1+S^2)}}$$

выражается через интеграл перекрытия ВФ

$$S = \int \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 = \frac{1}{\pi a_0^3} \int \exp\left(-\frac{r_{a1} + r_{b1}}{a_0}\right) dr.$$

Учитывая, что функции $\psi_a(\mathbf{r}_i)$, входящие в (15.28), (15.29) — собственные функции одночастичных гамильтонианов \hat{H}_i^0 :

$$\hat{H}_1^0\psi_a(\mathbf{r}_1) = E_0\psi_a(\mathbf{r}_1), \quad (15.30)$$

в первом порядке теории возмущений получим

$$E_s = 2E + \frac{Q+J}{1+S^2}, \quad E_t = 2E + \frac{Q-J}{1+S^2},$$

где кулоновский интеграл Q и обменный интеграл J определяются формулами

$$Q = \int \psi_a^*(\mathbf{r}_1)\psi_a^*(\mathbf{r}_2)\hat{V}\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_a(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2,$$

$$J = \int \psi_a^*(\mathbf{r}_1)\psi_b^*(\mathbf{r}_2)\hat{V}\psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2.$$

Вычисление интегралов Q и J для молекулы водорода возможно и в явном виде, но оно очень громоздко. Зависимость энергии термов от относительного расстояния между ядрами R/a_0 изображена на рис. 44. Существенно, что обменный интеграл отрицателен и энергия меньше для синглетного терма с ВФ (15.28). Электронный терм синглетного состояния имеет соответствующий устойчивому состоянию минимум с параметрами $R_0 = 0,80 \text{ \AA}$, $E_{\min} = 3,2 \text{ эВ}$. Экспериментальные значения этих величин суть $R_0 = 0,74 \text{ \AA}$, $E_{\min} = 4,7 \text{ эВ}$. Для триплетного состояния (15.29) устойчивое состояние отсутствует.

Таким образом, возможность соединения атомов в молекулу зависит от спинового состояния электронов. Это обстоятельство мож-

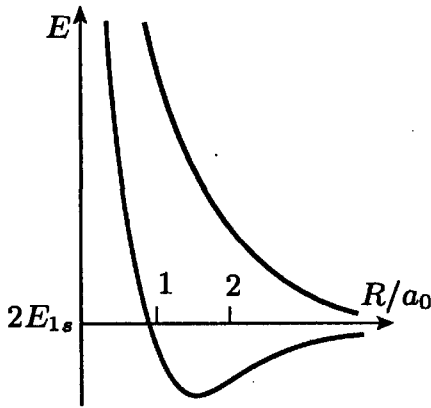


Рис. 44

но качественно пояснить, рассматривая координатные ВФ (15.28) и (15.29). Координатная функция триплетного состояния обращается в нуль в плоскости, перпендикулярной линии, соединяющей ядра, и проходящей посередине между ними. Координатная функция синглетного состояния в этой плоскости максимальна. Поэтому велика вероятность нахождения электронов между ядрами, что приводит к меньшему значению энергии синглетного состояния.

Отбирая в качестве возмущения оператор \hat{V} , мы считали, что электроны описываются атомными ВФ, т. е. локализованы вблизи своих ядер. Такой вид химической связи, при котором электроны не смещаются заметным образом от одного ядра к другому, носит название гомеоплярной связи.

ЗАДАЧИ

1. Используя результат задачи п. 8.3, найти выражение для колебательной энергии иона H_2^+ и оценить максимально возможное значение колебательного квантового числа.

2. Энергия нулевых колебаний и энергия диссоциации молекулы H_2 равны соответственно 0,26 эВ и 4,46 эВ. Найти энергию диссоциации молекулы D_2 .

3. Показать, что вычисление электронных термов молекулы водорода с использованием ВФ, построенной из молекулярных орбиталей

$$\psi_{ms} = [\psi_a(\mathbf{r}_1) + \psi_b(\mathbf{r}_2)][\psi_a(\mathbf{r}_2) + \psi_b(\mathbf{r}_1)],$$

приводит к большему значению $E(R)$, чем метод Гайтлера–Лондона.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

0. В гл. 11 мы рассматривали изменение состояний системы под действием зависящего от времени внешнего поля. Под внешним полем практически всегда подразумевается электромагнитное поле, создаваемое классическим источником. Влияние изменений состояния системы на состояние источника при этом не учитывается. Такой подход, очевидно, неприменим для описания явлений, в которых источником поля является квантовая система. В таких задачах электромагнитное поле также должно быть описано квантовым образом.

1. В основе квантовомеханического описания лежит использование классических уравнений движения для системы в гамильтоновой форме. Рассмотрим гамильтонов формализм для электромагнитного поля. Уравнения Максвелла для поля в вакууме имеют вид

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{E} = 0, \quad (16.1)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{H} = 0.$$

Введем векторный потенциал \mathbf{A} , удовлетворяющий кулоновской калибровке:

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0. \quad (16.2)$$

Тогда из уравнений (16.1) следует волновое уравнение для вектор-потенциала

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0. \quad (16.3)$$

Допустим, что все поле излучения находится в кубе с ребром L и подчинено граничным условиям периодичности на стенках куба. Тогда решение уравнения (16.3) можно представить в виде разложения по полной системе функций

$$\mathbf{A} = \sum_{\lambda} [a_{\lambda}(t) \mathbf{A}_{\lambda}(\mathbf{r}) + a_{\lambda}^*(t) \mathbf{A}_{\lambda}^*(\mathbf{r})], \quad (16.4)$$

где коэффициенты a_{λ} зависят только от времени. Решение уравнений для функций $\mathbf{A}_{\lambda}(\mathbf{r})$, удовлетворяющих условиям периодичности поперечности, имеет следующий вид:

$$\mathbf{A}_{\lambda}(\mathbf{r}) = N e_{\lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (16.5)$$

Здесь вектор \mathbf{e}_λ , подчиненный требованию

$$\mathbf{e}_\lambda \mathbf{k}_\lambda = 0, \quad (16.6)$$

задает направление поляризации, а вектор \mathbf{k} , определяющий направление распространения, может принимать лишь дискретный набор значений

$$k_{\lambda i} = \frac{2\pi n_{\lambda i}}{L}, \quad (16.7)$$

где $n_{\lambda i}$ — целое число. Итак, для задания состояния $\mathbf{A}_\lambda(\mathbf{r})$ надо указать значения четырех параметров: $n_{1\lambda}$, $n_{2\lambda}$, $n_{3\lambda}$, α . Параметр α указывает поляризацию и принимает два значения. Решение (16.5) может быть умножено на постоянный множитель, определенный из условия нормировки. Потребуем выполнения равенства

$$\int \mathbf{A}_k \mathbf{A}_l^* d\mathbf{r} = 4\pi c^2 \delta_{kl}. \quad (16.8)$$

Соответствующие решения (16.5) примут вид

$$\mathbf{A}_\lambda = \mathbf{e}_\lambda \sqrt{\frac{4\pi c^2}{L^3}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (16.9)$$

Зависимость от времени коэффициентов $a_\lambda(t)$ определяется формулой

$$a_\lambda(t) = |a_\lambda| e^{-i\omega t}, \quad \omega_\lambda = c |\mathbf{k}_\lambda|. \quad (16.10)$$

Полная энергия поля в кубе L^3 есть

$$E = \frac{1}{8\pi} \int (\mathbf{E}^2 + \mathbf{H}^2) d\mathbf{r}. \quad (16.11)$$

Выражая поля \mathbf{E} и \mathbf{H} через векторный потенциал с помощью соотношений

$$\mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A} \quad (16.12)$$

и используя решение волнового уравнения в виде (16.4), (16.9), получим

$$E = \sum_{\lambda} 2\omega a_{\lambda} a_{\lambda}^*. \quad (16.13)$$

Введем классические действительные переменные

$$Q_{\lambda} = a_{\lambda} + a_{\lambda}^*, \quad P_{\lambda} = -i\omega_{\lambda} (a_{\lambda} - a_{\lambda}^*). \quad (16.14)$$

Тогда выражение для полной энергии поля (в кубе L^3) может быть представлено в виде

$$E = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} (P_{\lambda}^2 + \omega_{\lambda}^2 Q_{\lambda}^2) = H_{FC}. \quad (16.15)$$

Это выражение можно рассматривать как запись классической функции Гамильтона для свободного поля в кубе L^3 в канонических переменных P_λ, Q_λ . Соответствующие уравнения Гамильтона имеют вид

$$\frac{\partial H_{FC}}{\partial P_\lambda} = P_\lambda = \dot{Q}_\lambda, \quad (16.16)$$

$$\frac{\partial H_{FC}}{\partial Q_\lambda} = \omega_\lambda^2 Q_\lambda = -\dot{P}_\lambda. \quad (16.17)$$

2. Обобщая основные положения на описание немеханических систем, для квантового описания свободного электромагнитного поля мы заменим классические канонические переменные P_λ, Q_λ на операторы, удовлетворяющие перестановочным соотношениям

$$[\hat{P}_\lambda, \hat{Q}_\mu] = -i\hbar\delta_{\lambda\mu}, \quad (16.18)$$

$$[\hat{P}_\lambda, \hat{P}_\mu] = [\hat{Q}_\lambda, \hat{Q}_\mu] = 0.$$

Как классическая функция Гамильтона (16.5), так и гамильтониан для свободного поля распадаются на сумму гамильтонианов невзаимодействующих осцилляторов:

$$\hat{H} = \sum_\lambda \hat{H}_\lambda = \frac{1}{2} \sum_\lambda (\hat{P}_\lambda^2 + \omega_\lambda^2 \hat{Q}_\lambda^2). \quad (16.19)$$

Собственные значения энергии каждого осциллятора определяются, как известно, формулой

$$E_{n\lambda} = \hbar\omega_\lambda (n_\lambda + 1/2). \quad (16.20)$$

Рассмотрим классическое выражение для импульса поля

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} \int [\mathbf{E} \times \mathbf{H}] dr. \quad (16.21)$$

При подстановке в это соотношение выражений для полей (16.12) мы приходим к формуле

$$\mathbf{S} = \sum_\lambda \mathbf{S}_\lambda = \sum_\lambda 2\omega_\lambda \mathbf{k}_\lambda a_\lambda a_\lambda^*. \quad (16.22)$$

Выражение (16.22) отличается от формулы (16.13) для энергии поля лишь наличием векторных (неоператорных) множителей. Поэтому при переходе к квантовому описанию оператор импульса электромагнитного поля коммутирует с гамильтонианом, а его собственные значения для каждого из осцилляторов поля суть

$$\mathbf{S}_{n\lambda} = \mathbf{k}_\lambda \hbar (n_\lambda + 1/2). \quad (16.23)$$

Таким образом, энергия и импульс электромагнитной волны коммутируют, что в квантовой механике частиц соответствует случаю свободного движения. Далее, разности энергий и импульсов плоской

волны с заданным значением λ и основного состояния поля кратны величинам $\hbar\omega_\lambda$ и $\hbar\omega_\lambda c^{-1}$ соответственно. Поэтому плоскую поперечную электромагнитную волну можно рассматривать как систему невзаимодействующих частиц — *фотонов* — с энергией $\hbar\omega_\lambda$ и импульсом $\hbar\omega_\lambda c^{-1} \mathbf{n}$.

3. Как и при рассмотрении гармонического осциллятора в п. 3.6, введем безразмерные операторы

$$\hat{a}_\lambda^+ = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda}} (\omega \hat{Q}_\lambda - i \hat{P}_\lambda), \quad (16.24)$$

$$\hat{a}_\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_\lambda}} (\omega \hat{Q}_\lambda + i \hat{P}_\lambda). \quad (16.25)$$

Из коммутационных соотношений (16.18) следуют перестановочные соотношения для операторов

$$\begin{aligned} [\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\lambda^+] &= 1, \\ [\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\mu] &= [\hat{a}_\lambda, \hat{a}_\mu^+] = 0. \end{aligned} \quad (16.26)$$

Таким образом, операторы \hat{a}^+ и \hat{a} можно рассматривать как операторы рождения и уничтожения фотонов, действующие в пространстве чисел заполнения с базисными функциями (16.10). Из (16.26) видно, что фотоны являются бозонами.

Гамильтониан свободного электромагнитного поля, выраженный через операторы \hat{a}_λ^+ и \hat{a}_λ , имеет вид

$$\hat{H} = \sum_\lambda \frac{\hbar\omega_\lambda}{2} (\hat{a}_\lambda \hat{a}_\lambda^+ + \hat{a}_\lambda^+ \hat{a}_\lambda) = \sum_\lambda \hbar\omega_\lambda \left(\hat{n}_\lambda + \frac{1}{2} \right). \quad (16.27)$$

Выражение для оператора вектор-потенциала $\hat{\mathbf{A}}$ через операторы рождения и уничтожения фотонов можно записать, сравнив формулы (16.15) и (16.24):

$$\hat{\mathbf{A}} = \sum_\lambda (\hat{a}_\lambda \mathbf{A}_\lambda + \hat{a}_\lambda^+ \mathbf{A}_\lambda^*). \quad (16.28)$$

При переходе от классического выражения для функции Гамильтона к оператору Гамильтона (16.19) мы можем, как и в механике частиц, считать зависимость от времени включенной только в ВФ \mathbf{A}_λ (представление Шредингера) или только в операторы \hat{P}_λ , \hat{Q}_λ (представление Гейзенберга). Мы выберем первый вариант — представление Шредингера. Зависящие от времени ВФ имеют вид

$$\mathbf{A}_\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3\omega}} \mathbf{e}_\alpha e^{i(\mathbf{kr} - \omega t)}. \quad (16.29)$$

4. Рассмотрим УШ для нерелятивистской заряженной частицы без спина, взаимодействующей с переменным электромагнитным полем, которое будем описывать классическими (не операторными) потенциалами \mathbf{A} и φ . УШ имеет вид

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + e\varphi(r) \right] \psi - \frac{e}{2mc} (\mathbf{p}\mathbf{A} + \mathbf{A}\mathbf{p}) \psi + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 \psi. \quad (16.30)$$

Второй член в правой части преобразуем с помощью равенства

$$[\mathbf{p}, \mathbf{A}] = -i\hbar \operatorname{div} \mathbf{A}. \quad (16.31)$$

Если векторный потенциал удовлетворяет условию кулоновской калибровки (16.2), то УШ примет вид

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + e\varphi(r) \right] \psi - \frac{e}{mc} \mathbf{A}\mathbf{p}\psi + \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 \psi. \quad (16.32)$$

Оценим порядок величин в правой части для внешнего поля, гармонически меняющегося во времени:

$$A(t) = \frac{c\mathcal{E}}{\omega} \sin \omega t. \quad (16.33)$$

Тогда если импульс частицы имеет типичную для атомных систем величину $p \sim me^2\hbar^{-1}$, то члены в правой части (16.32) имеют порядок величины E_0 , $E_0\beta$ и $E_0\beta^2$ соответственно, где β — безразмерный параметр:

$$\beta = \frac{e\mathcal{E}}{\omega p} = \frac{\mathcal{E}\hbar}{me\omega}. \quad (16.34)$$

В оптическом диапазоне ($\omega \approx 10^{15} \text{ с}^{-1}$) параметр β сравним с единицей в полях с напряженностью $\mathcal{E} \approx 10^6$ ед. СГСЭ $\approx 10^8 \text{ В/см}$, т. е. при интенсивности излучения $I \sim 10^{15} \text{ Вт/см}^2$. Чаще приходится иметь дело с полями, в которых выполняется условие $\beta \ll 1$. Поэтому второй и третий члены в правой части (16.32) можно рассматривать как малые возмущения. Отметим, что даже при $\beta \ll 1$ членом, квадратичным по A , нельзя пренебрегать по сравнению с линейным, так как они описывают различные явления.

5. Рассмотрим взаимодействие квантовомеханической системы с квантованным электромагнитным полем. Для этого в УШ (16.32) заменим классическое выражение для вектор-потенциала на оператор (16.28). В дальнейшем для краткости квантовомеханическую систему будем называть атомом. Гамильтониан системы «атом + поле» имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_a + \hat{V} + \hat{H}_F, \quad (16.35)$$

где

$$\hat{H}_F = \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} \left(\hat{a}_{\lambda}^+ \hat{a}_{\lambda} + \frac{1}{2} \right),$$

$$\hat{V}(t) = -\frac{e}{m} \mathbf{p} \sum_{\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{L^3 \omega_{\lambda}}} \mathbf{e}_{\alpha} \cdot \left(\hat{a}_{\lambda} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} + \hat{a}_{\lambda}^+ e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} \right). \quad (16.36)$$

Отметим, что оператор взаимодействия зависит от времени явно. В (16.35) мы опустили оператор возмущения, квадратичный по вектор-потенциалу.

В отсутствие взаимодействия стационарные состояния системы описываются произведениями СФ гамильтониана атома $|v\rangle$ (под v понимается набор квантовых чисел) и СФ гамильтониана свободного поля в представлении чисел заполнения $|n_{\lambda}\rangle$. Здесь n_{λ} означает число фотонов с заданными значениями волнового вектора \mathbf{k}_{λ} и поляризации \mathbf{e}_{α} . Матричные элементы зависящего от времени оператора $\hat{V}(t)$ в первом порядке теории возмущений отличны от нуля только между функциями состояний, в которых число фотонов с некоторым λ отличается на единицу:

$$\langle v, n_{\lambda} | \hat{V} | \mu, n_{\lambda} + 1 \rangle = \langle v, n | \hat{V}_{\lambda}^{-} | \mu, n + 1 \rangle,$$

где введен оператор

$$\hat{V}_{\lambda}^{-} = -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{L^3 \omega_{\lambda}}} \mathbf{e}_{\alpha} \hat{\mathbf{p}} \hat{a}_{\lambda} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}. \quad (16.37)$$

Такой переход соответствует поглощению фотона атомом. Аналогично, переход, соответствующий испусканию фотона, определяется вторым слагаемым в операторе \hat{V} :

$$\langle v, n_{\lambda} | \hat{V} | \mu, n_{\lambda} - 1 \rangle = \langle v, n | \hat{V}_{\lambda}^{+} | \mu, n - 1 \rangle,$$

где введен оператор

$$\hat{V}_{\lambda}^{+} = -\frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{L^3 \omega_{\lambda}}} \mathbf{e}_{\alpha} \hat{\mathbf{p}} \hat{a}_{\lambda}^+ e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}.$$

6. Пусть в начальный момент времени поле находится в вакуумном состоянии — все числа заполнения равны нулю. Тогда единственным возможным процессом будет испускание фотона. Поскольку при размерах куба L^3 , больших по сравнению с длиной волны фотона λ , спектр свободного поля является квазинепрерывным, мы используем полученное в п. 11.8 золотое правило Ферми:

$$P_{fi}^{+} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f, 1 | \hat{V}_{\lambda}^{+} | i, 0 \rangle \right|^2 \rho(E_f), \quad (16.38)$$

где индексы f и i относятся к конечному и начальному состоянию атома соответственно. Определим плотность числа состояний. Число состояний поля с фотоном, импульс которого лежит в интервале значений $(p, p + dp)$ и интервале углов $d\Omega$, есть*

$$dN = \frac{L^3 p^2 dp d\Omega}{(2\pi\hbar)^3} = \frac{L^3 \varepsilon^2 dp d\Omega}{c^2 (2\pi\hbar)^3}.$$

В последнем выражении через ε обозначена энергия фотона с величиной импульса p :

$$\varepsilon = cp = \hbar\omega.$$

Учитывая это равенство, для функции плотности состояний получаем выражение

$$d\rho(\varepsilon) = \frac{dN_p}{d\varepsilon} = \frac{L^3 \omega^2 d\Omega}{\hbar (2\pi c)^3}. \quad (16.39)$$

Подставляя это выражение в формулу (16.38), получим

$$\begin{aligned} dP_{fi} &= \frac{2\pi}{\hbar^2} \frac{L^3 \omega^2}{(2\pi c)^3} \left| \langle f | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | i \rangle \frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{L^3 \omega}} \mathbf{e}_\alpha \right|^2 d\Omega = \\ &= \frac{\omega e^2}{2\pi m^2 \hbar c^3} \left| \langle f | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | i \rangle \mathbf{e}_\alpha \right|^2 d\Omega. \end{aligned}$$

Наибольший вклад в матричный элемент

$$\langle f | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | i \rangle = \int \varphi_f^*(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} \varphi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$$

дают области значений r , в которых атомные ВФ заметным образом отличны от нуля: $r \sim a_0 \approx 0,5 \cdot 10^{-8}$ см. В оптическом диапазоне $k \sim 10^5$ см $^{-1}$, и в существенной области интегрирования показатель экспоненты оказывается малым. Ограничиваясь первым членом разложения

$$e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 1 - i\mathbf{k}\mathbf{r} - \frac{(\mathbf{k}\mathbf{r})^2}{2!} + \dots, \quad (16.40)$$

получаем

$$\langle f | e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} | i \rangle \approx \langle f | \hat{\mathbf{p}} | i \rangle.$$

Учитывая доказанное в п. 2.9 тождество

$$\frac{i\hbar}{m} \langle f | \hat{\mathbf{p}} | i \rangle = \hbar\omega_{fi} \langle f | \mathbf{r} | i \rangle,$$

получаем для dP^+ следующее выражение:

$$dP_{fi}^+ = \frac{\omega^3}{2\pi c^3 \hbar} |\mathbf{d}_{fi} \mathbf{e}_\alpha|^2 d\Omega. \quad (16.41)$$

Здесь \mathbf{d}_{fi} означает матричный элемент дипольного момента: $\mathbf{d} = e\mathbf{r}$. Выбирая ось сферической системы координат в направлении импульса фотона \mathbf{k} и учитывая, что вектор поляризации ортогонален импульсу, представим (16.41) в виде

$$dP_{fi}^+ = \frac{\omega^3}{2\pi c^3 \hbar} |\mathbf{d}_{fi}|^2 \sin^2 \theta d \cos \theta d\varphi.$$

Полная вероятность испускания фотона в единицу времени определится интегрированием по углам θ и φ :

$$P_{fi}^+ = \frac{4}{3} \alpha \left(\frac{r_{fi}}{c} \right)^2 \omega^3, \quad (16.42)$$

где α — постоянная тонкой структуры. Для атомов матричный элемент r_{fi} по порядку величины равен $e^2/\hbar\omega$ и вероятность излучения P_{fi} в единицу времени имеет порядок

$$P_{fi}^+ \approx \alpha^3 \omega. \quad (16.43)$$

Вероятности переходов при наличии фотонов в состоянии с числами λ отличаются от P_{fi}^+ только числовыми множителями. Учитывая соотношения

$$\begin{aligned} \langle n+1 | \hat{a}^+ | n \rangle &= \sqrt{n+1}, \\ \langle n-1 | \hat{a} | n \rangle &= \sqrt{n}, \end{aligned}$$

получаем

$$P_a \left\{ \langle n_\lambda - 1 | \hat{V}_\lambda^- | n_\lambda \rangle \right\} = n_\lambda P^+, \quad (16.44)$$

$$P_e \left\{ \langle n_\lambda + 1 | \hat{V}_\lambda^+ | n_\lambda \rangle \right\} = (n_\lambda + 1) P^+. \quad (16.45)$$

Процесс испускания фотонов в отсутствие квантов в начальном состоянии называется *спонтанным излучением*. Процесс испускания, связанный с наличием квантов в начальном состоянии, с вероятностью в единицу времени

$$P_{SE} = n_\lambda P^+$$

называется *вынужденным излучением*. Формула (16.44) относится, очевидно, к поглощению.

7. Заметим, что в выражение для вероятности спонтанного излучения P^+ не входит объем куба периодичности L^3 . Поэтому его можно отнести к излучению атома в свободном пространстве. То обстоятельство, что вероятности процессов, происходящих в присутствии поля, (16.44), (16.45) также не зависят от объема L^3 , позволяет установить связь между локальной плотностью энергии поля

$$W = \frac{1}{8\pi} (E^2 + H^2)$$

и числом фотонов в единице объема n_λ , которое входит в вычисления, предполагая, что соотношения (16.20), (16.23) выполняются и в этом случае.

Формула (16.45) указывает условие применимости классического рассмотрения электромагнитного поля, действующего на атом; таким условием является неравенство $n_\lambda \gg 1$.

Отметим также, что использованная нами ВФ фотона

$$A_\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{L^3\omega}} e_\sigma e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}$$

соответствует однородному распределению координаты в объеме L^3 (как и для нерелятивистской частицы с заданным импульсом). Однако функция, определенная таким образом, не является калибровочно инвариантной. Заменяя e_α на $e_\alpha + \mathbf{k}f(\omega)$, мы получим прежние выражения для полей \mathbf{E} и \mathbf{H} , но другое выражение для плотности вероятности координат фотона.

8. Электромагнитное излучение, вероятность которого определяется матричным элементом дипольного момента, называется *дипольным электрическим излучением* или $E1$ -излучением. Рассмотрим матричные элементы дипольных переходов для частицы, связанной в центральном поле. Состояние системы определяется квантовыми числами n, l, m . Волновая функция допускает разделение переменных

$$\psi(\theta, \varphi, r) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Угловая часть ВФ имеет вид

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Pi_l^m(\cos\theta) \frac{(-1)^{m+l} e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (16.46)$$

где $\Pi_l^m(\cos\theta)$ — нормированные присоединенные функции Лежандра:

$$\Pi_l^m(\cos\theta) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta).$$

Матричный элемент компоненты дипольного момента может быть записан в виде

$$\langle \nu\lambda\mu | d_i | nlm \rangle = \iint R_{nl} R_{\nu\lambda}^* d_i Y_{\lambda\mu}^* Y_{lm} r^2 dr d\Omega. \quad (16.47)$$

Вместо декартовых компонент d_x, d_y, d_z мы воспользуемся разложением вектора \mathbf{d} по сферическим гармоникам:

$$\begin{aligned} d_0 &= er \cos\theta = \gamma \cdot 2^{-1/2} r Y_{10} = d_z, \\ d_1 &= er \sin\theta e^{i\varphi} = \gamma r Y_{11} = d_x + id_y, \\ d_{-1} &= er \sin\theta e^{-i\varphi} = \gamma r Y_{1,-1} = d_x - id_y, \end{aligned}$$

где

$$\gamma = e\sqrt{\frac{8\pi}{3}}.$$

Рассмотрим вычисление интеграла (16.47):

$$\langle \nu\lambda\mu | d_{\alpha\alpha} | nlm \rangle = \gamma \cdot 2^{\frac{1}{2}(|\alpha|-1)} \int R_{\nu\lambda} R_{nl} r^3 dr \int Y_{\lambda\mu}^* Y_{lm} Y_{1\alpha} d\Omega.$$

Начнем с интеграла по угловым переменным:

$$I_{\alpha}^{(\Omega)} = \int \Pi_l^m(\cos\theta) \Pi_{\lambda}^{\mu}(\cos\theta) \Pi_1^{\alpha}(\cos\theta) \cdot I_{\alpha}^{(\varphi)} d\cos\theta,$$

$$I_{\alpha}^{(\varphi)} = (2\pi)^{-3/2} \int (-1)^{\mu+m+\alpha} i^{(l-\lambda+1)} e^{i(m+\alpha-\mu)\varphi} d\varphi.$$

Последний интеграл вычисляется элементарно:

$$I_{\alpha}^{(\varphi)} = \frac{(-1)^{\mu+m+\alpha} i^{(l-\lambda+1)} e^{i(m+\alpha-\mu)\varphi}}{(2\pi)^{3/2} i(m+\alpha-\mu)} \Big|_0^{2\pi}.$$

Он обращается в нуль, если только не выполняется условие

$$m + \alpha - \mu = 0,$$

при котором

$$I_{\alpha}^{(\varphi)} = \frac{i^{(l-\lambda+1)}}{\sqrt{2\pi}}.$$

Для вычисления интеграла по θ воспользуемся значениями низших присоединенных функций Π_l^m :

$$\Pi_1^0(x) = \sqrt{\frac{3}{2}}x, \quad \Pi_1^{\pm 1}(x) = \sqrt{\frac{3}{4}}\sqrt{1-x^2},$$

соотношением ортогональности

$$\int_{-1}^1 \Pi_l^m(x) \Pi_{\lambda}^{\mu}(x) dx = \delta_{l\lambda}$$

и рекуррентными формулами

$$x\Pi_l^m(x) = \sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}}\Pi_{l+1}^m + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}}\Pi_{l-1}^m, \quad (16.48)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{1-x^2}\Pi_l^m(x) &= \\ &= -\sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}\Pi_{l+1}^{m-1} + \sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l+1)(2l-1)}}\Pi_{l-1}^{m-1}, \end{aligned} \quad (16.49)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{1-x^2}\Pi_l^m(x) &= \\ &= +\sqrt{\frac{(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)}}\Pi_{l+1}^{m+1} - \sqrt{\frac{(l-m)(l+m-1)}{(2l+1)(2l-1)}}\Pi_{l-1}^{m-1}. \end{aligned} \quad (16.50)$$

Рассмотрим $I_0^{(\Omega)}$:

$$I_0^{(\Omega)} = \int_{-1}^{+1} \Pi_l^m(x) \Pi_\lambda^\mu(x) \sqrt{\frac{3}{2}} x \frac{1}{\sqrt{2\pi}} i^{(l+1-\lambda)} dx.$$

Учитывая формулу (16.48), получаем

$$\begin{aligned} I_0^{(\Omega)} &= \frac{i^{(l-\lambda+1)}}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{3}{2}} \left[\sqrt{\frac{(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} \delta_{l+1,\lambda} + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}} \delta_{l-1,\lambda} \right]. \end{aligned} \quad (16.51)$$

Таким образом, отличны от нуля будут только матричные элементы переходов между состояниями с l и $l \pm 1$. Используя (16.49), (16.50), можно показать, что то же требование распространяется и на переходы с $\lambda = \pm 1$. Для них

$$\begin{aligned} I_1^{(\Omega)} &= \frac{i^{(l+1-\lambda)}}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{3}{4}} \left[\sqrt{\frac{(l+m+2)(l+m+1)}{(2l+1)(2l+3)}} \delta_{l,\lambda-1} - \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\frac{(l-m)(l-m-1)}{(2l+1)(2l-1)}} \delta_{l,\lambda+1} \right], \end{aligned} \quad (16.52)$$

$$\begin{aligned} I_{-1}^{(\Omega)} &= \frac{i^{(l-\lambda+1)}}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{3}{4}} \left[-\sqrt{\frac{(l-m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)}} \delta_{l,\lambda-1} + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\frac{(l+m)(l+m-1)}{(2l+1)(2l-1)}} \delta_{l,\lambda+1} \right]. \end{aligned} \quad (16.53)$$

Таким образом, в дипольном приближении для частицы, связанной в центральном поле, отличны от нуля только матричные элементы переходов из состояния (n, l, m) в состояние (v, λ, μ) , где

$$\lambda = l \pm 1, \quad \mu = m, \quad m \pm 1. \quad (16.54)$$

9. Формулы (16.54) задают правила отбора для векторного оператора \mathbf{d} .

В случае многоэлектронного атома в дипольном приближении возможны лишь такие изменения электронной конфигурации, при которых изменяются квантовые числа n , l только одного электрона, так как оператор суммарного дипольного момента $\sum_i e\mathbf{r}_i$ есть аддитивный оператор.

Из правил отбора следует, что при дипольном излучении или поглощении одного фотона момент атома изменяется на единицу. Поскольку система «атом+поле» замкнута, то из закона сохранения момента в этом случае следует необходимость приписать фотону момент импульса, равный единице. Используемая нами при вычислениях координатная приближенная ВФ фотона изотропна. Поэтому разумно предположить, что этот момент связан со спиновым состоянием, и приписать фотону спин, равный единице. Частица с конечной массой покоя и спином, равным единице, при заданном значении импульса p находится в трех различных спиновых состояниях с проекциями s на направление импульса, равными 1, 0 и -1 . Для фотона возможны лишь два направления поляризации: $s_p = \pm 1$. Это связано с равенством нулю массы покоя фотона, которое выражается условием поперечности векторных ВФ фотона.

10. В качестве примера вычислим вероятность спонтанного перехода между состояниями $2p \rightarrow 1s$ в атоме водорода. Для переходов из p -состояния в s -состояние вероятности переходов вне зависимости от величины Δm равны

$$P^+ = \frac{1}{3} \frac{\omega^3 e^2}{2\pi c^3 \hbar} \frac{8\pi}{3} R^2, \quad (16.55)$$

где через R обозначен радиальный интеграл

$$R = \int R_{\nu\lambda} r R_{l'n} r^2 dr.$$

Радиальные ВФ имеют (в атомных единицах) вид

$$R_{10}(r) = 2e^{-r},$$

$$R_{21}(r) = \frac{1}{2\sqrt{6}} e^{-r/2}.$$

Радиальный интеграл вычисляется элементарно:

$$R = \frac{1}{\sqrt{6}} \int e^{3r/2} r^4 dr = 2^{15/2} \cdot 3^{-9/2}.$$

Переходя к обычным единицам и подставляя это значение в формулу (16.55), получим

$$P^+ = \frac{4}{9} \frac{\omega^3 e^2}{\hbar c^3} \frac{2^{15}}{3^9} \frac{\hbar^4}{m^2 e^4}.$$

Частота излучения определяется формулой

$$\omega = \frac{1}{\hbar} [E(2p) - E(1s)] = \frac{3}{8} \frac{me^4}{\hbar^3}.$$

Отсюда находим окончательное значение:

$$P^+ = \left(\frac{2}{3}\right)^8 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3 \frac{me^4}{\hbar^3},$$

или $P^+ = 6,2 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1}$.

11. Если матричный элемент d_{fi} обращается в нуль, то говорят, что дипольный переход между состояниями $|i\rangle$ и $|f\rangle$ запрещен. В этом случае для вычисления вероятностей перехода следует улучшить приближение (16.40), положив

$$e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \approx 1 - i\mathbf{k}\mathbf{r}.$$

Матричный элемент перехода определится интегралом

$$I_1 = \int \psi_f^*(\mathbf{r}) (\mathbf{k}\mathbf{r}) (\hat{\mathbf{p}}\mathbf{e}_\alpha) \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Поскольку $\mathbf{k}\mathbf{e} = 0$, удобно выбрать направления векторов \mathbf{k} и \mathbf{e} за оси декартовых координат, например Ox и Oy соответственно. Тогда интеграл примет вид

$$I_1 = \langle f | k(x\hat{p}_y) | i \rangle = \frac{1}{2} \langle f | (xp_y + p_x y) + (xp_y - p_x y) | i \rangle.$$

Второй член пропорционален z -компоненте орбитального момента \hat{l}_z . Аналогично, для других направлений k , \mathbf{e} матричные элементы равны

$$\frac{ke}{2} \langle f | \hat{l}_x | i \rangle, \quad \frac{ke}{2} \langle f | \hat{l}_y | i \rangle.$$

Излучение при переходах, вероятности которых определяются этими матричными элементами, называется *магнитным дипольным* или $M1$ -излучением. В нерелятивистском приближении при движении в центральном поле орбитальный момент сохраняется и не имеет недиагональных матричных элементов, отличных от нуля. Поэтому магнитные дипольные переходы в этом приближении запрещены.

Для многоэлектронных атомов в случае LS -связи $M1$ -переходы должны удовлетворять правилам отбора

$$\Delta n_i = 0, \quad \Delta l_i = 0 \tag{16.56}$$

для всех одноэлектронных ВФ. Поэтому возможны переходы только между двумя состояниями, принадлежащими одной конфигурации и обладающими одинаковыми значениями L и S . Разности энергий таких состояний малы и соответствуют излучению частот микроволнового диапазона.

Первый член может быть преобразован следующим образом:

$$x\hat{p}_y + y\hat{p}_x = \frac{1}{2} (\nabla^2 yx - yx \nabla^2) = -\frac{m}{\hbar^2} [xy, \hat{H}_a] = \hat{b}.$$

Вычисляя матричный элемент оператора \hat{b} между состояниями $|m\rangle$ и $|n\rangle$, получим

$$\langle m|\hat{b}|n\rangle = -\frac{m}{\hbar^2} \sum_l \left(\langle m|yx|l\rangle \langle l|\hat{H}|n\rangle - \langle m|\hat{H}|l\rangle \langle l|yx|n\rangle \right).$$

Учитывая, что у гамильтониана \hat{H} в собственном представлении отличны от нуля только диагональные элементы, получим

$$\frac{1}{2} k \langle f|x\hat{p}_y + y\hat{p}_x|i\rangle = \frac{k}{2} \frac{m\omega}{\hbar} \langle m|yx|n\rangle.$$

Излучение, испускаемое системой при переходах, вероятности которых определяются такими матричными элементами, называется *электрическим квадрупольным* или E2-излучением.

Правила отбора для квадрупольных переходов можно получить из правил (16.54), представив матричный элемент в виде

$$\langle m|yx|n\rangle = \sum_l \langle m|y|l\rangle \langle l|x|n\rangle.$$

Таким образом, для квадрупольного излучения отличны от нуля вероятности переходов из состояния (n, l, m) в состояние (v, λ, μ) , где

$$\lambda = l \neq 0, \quad \lambda = l \pm 2, \quad |\mu - m| \leq 2.$$

Напомним, что все вычисления в пп. 16.8–16.11 относились к случаю, когда состояние системы можно описывать УШ без учета релятивистских поправок. В частности, во всех рассмотренных случаях выполнялось условие

$$S_{zf} = S_{zi}.$$

При учете взаимодействия спинового магнитного момента с внешним полем отличные от нуля матричные элементы M1-переходов возможны и для частицы в центральном поле.

12. Выше мы установили, что возбужденные состояния атомов при учете взаимодействия с электромагнитным полем не являются стационарными. Даже при отсутствии фотонов в начальный момент амплитуда возбужденного состояния атома со временем изменяется:

$$a_{10}(t) \approx 1 - \frac{P_{fi}}{2} t,$$

$$1/\omega_{10} \ll t \ll 1/P_{fi}.$$

Поэтому начальное состояние системы «атом + поле» не обладает определенной энергией. Рассмотрим однофотонный переход

между возбужденным состоянием атома $|1\rangle$ с энергией E_1 (вычисленной без учета взаимодействия с полем) и основным состоянием $|0\rangle$ с энергией E_0 . При временах, больших по сравнению с P_{fi}^{-1} , атом почти наверное будет находиться в основном состоянии с определенной энергией E_0 . Но поскольку в начальном состоянии система «атом + поле» не обладала определенной энергией, то и конечное состояние поля (при $t \rightarrow \infty$) будет описываться некоторой функцией распределения по энергии. Найдем вид этой функции.

Уравнения движения для амплитуд начального состояния a_{10} и конечных состояний $a_{0\lambda}$ (индекс λ здесь означает квантовые числа фотонов) имеют вид

$$i\hbar \frac{da_{10}}{dt} = \sum_{\lambda} \langle 10 | \hat{V} | 0\lambda \rangle e^{i(\omega_0 - \omega)t} a_{0\lambda}, \quad (16.57)$$

$$i\hbar \frac{da_{0\lambda}}{dt} = \sum_{\lambda} \langle 0\lambda | \hat{V} | 10 \rangle e^{-i(\omega_0 - \omega)t} a_{10}. \quad (16.58)$$

Нас интересует решение этой системы с начальными условиями

$$a_{10}(0) = 1, \quad a_{0\lambda}(0) = 0.$$

Будем искать решение в виде

$$a_{10}(t) = e^{-\gamma t/2}. \quad (16.59)$$

Подстановка этого решения в уравнение (16.58) и интегрирование по времени с учетом начальных условий приводят к соотношению

$$a_{0\lambda} = \langle 0\lambda | \hat{V} | 10 \rangle \frac{\exp[i(\omega_{\lambda} - \omega_0)t - \gamma t/2] - 1}{\hbar(\omega_{\lambda} - \omega_0 + i\gamma/2)}. \quad (16.60)$$

Подстановка этого решения в уравнение (16.57) приводит к соотношению

$$-i\hbar \frac{\gamma}{2} = \sum_{\lambda} |V_{\lambda}|^2 \frac{1 - \exp[i(\omega_0 - \omega_{\lambda})t + \gamma t/2]}{\hbar(\omega_0 - \omega_{\lambda} - i\gamma/2)}.$$

Поскольку спектр фотонов квазинепрерывен, суммирование по λ можно заменить интегрированием по частотам. Итак

$$-i\hbar \frac{\gamma}{2} = \int_0^{\infty} \rho(k) |V_{\lambda}|^2 \frac{1 - \exp[i(\omega_0 - \omega_{\lambda})t + \gamma t/2]}{\hbar(\omega_0 - \omega_{\lambda} - i\gamma/2)} d\Omega d\omega.$$

Предполагая γ малым по сравнению с ω , мы можем пренебречь этой величиной в правой части. Разобьем функцию времени под интегралом на действительную и мнимую части:

$$F(\omega, t) = \frac{1 - \exp[i(\omega_0 - \omega)t]}{\omega_0 - \omega} = \frac{1 - \cos[(\omega_0 - \omega)t]}{\omega_0 - \omega} - i \frac{\sin[(\omega_0 - \omega)t]}{\omega_0 - \omega}.$$

В пределе $(\omega_0 - \omega)t \rightarrow \infty$ вклад в интеграл от действительной части даст только монотонная функция $(\omega_0 - \omega)^{-1}$, так как $\cos [(\omega_0 - \omega)t]$ быстро осциллирует. При этом интеграл от действительной части следует вычислять в смысле главного значения, учитывая нечетность $\text{Re } F(\omega)$. Таким образом, γ имеет отличную от нуля мнимую часть

$$\text{Im } \gamma = \frac{2}{\gamma} \int_0^{\infty} \rho(\omega) |V|^2 \frac{d\Omega d\omega}{\hbar(\omega_0 - \omega)}, \quad (16.61)$$

соответствующую поправке к средней частоте излучения. Обычно эта поправка незначительна. Интеграл от мнимой части $F(\omega)$ определяется окрестностью точки $\omega = \omega_0$:

$$\begin{aligned} -i \int_0^{\infty} \rho(\omega) |V|^2 d\Omega \int \frac{\sin [(\omega_0 - \omega)t]}{\omega_0 - \omega} d\omega &\approx \\ &\approx -i \int_0^{\infty} \rho(k_0) |V|^2 d\Omega \int \frac{\sin [(\omega_0 - \omega)t]}{\omega_0 - \omega} d\omega. \end{aligned}$$

Таким образом, действительная часть γ определяется равенством

$$\text{Re } \gamma = \frac{2\pi}{\hbar} \int \rho(k_0) |V|^2 \hbar^{-1} d\Omega$$

и равна полной вероятности излучения в единицу времени. Распределение фотонов в конечном состоянии по энергии можно получить из (16.60), положив $t \rightarrow \infty$:

$$|a_{0\lambda}(f)|^2 = \frac{|\hat{V}|^2}{\hbar^2} \frac{1}{(\omega_\lambda - \omega_0)^2 + \gamma^2/4}. \quad (16.62)$$

Интегрируя по телесному углу и умножая на плотность конечных состояний (в интервале энергий), получим с учетом (16.62)

$$dN(\omega) = \frac{\gamma}{2\pi} \frac{d\omega}{(\omega_\lambda - \omega_0)^2 + \gamma^2/4}. \quad (16.63)$$

Форма линии, описываемая выражением (16.63), называется *естественной* или лоренцевской.

Отметим, что ширина линии оказывается пропорциональной интенсивности спонтанного излучения: чем спектральная линия интенсивней, тем она шире. Такая же связь между шириной и интенсивностью линий имела и в классической модели осциллятора с радиационным затуханием. Однако при переходе между возбужденными состояниями ширина линии определяется суммой констант γ для верхнего и нижнего уровней:

$$\gamma_s = \gamma_i + \gamma_f.$$

Поэтому спектральная линия, соответствующая переходу в короткоживущее состояние, будет широкой, но, возможно, слабой.

13. Выше мы рассматривали переходы под действием электромагнитного поля, в которых как начальное, так и конечное состояния атома принадлежали дискретному спектру. Если энергия поглощаемого фотона $\hbar\omega$ больше потенциала ионизации I , то в результате поглощения один из атомных электронов может перейти в состояние, принадлежащее непрерывному спектру. Это явление называется *фотоэффектом*. Вероятность перехода в единицу времени определится формулой

$$P_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f, 0 | \hat{V}_\lambda^- | i, 1 \rangle \right|^2 \rho(E_f).$$

Основное упрощающее предположение в теории фотоэффекта состоит в замене ВФ конечного состояния, учитывающей взаимодействие электрона с атомным остатком, на ВФ свободного состояния — плоскую волну

$$\psi_{\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad \mathbf{q} = \hbar^{-1}\mathbf{p}.$$

Плотность числа конечных состояний для свободного электрона имеет вид

$$d\rho = \frac{L^3 pm}{(2\pi\hbar)^3} d\Omega. \quad (16.64)$$

Итак, вероятность испускания в единицу времени электрона с импульсом, лежащим внутри телесного угла $d\Omega$, имеет вид

$$dP_{fi} = \frac{L^3 pm}{(2\pi\hbar)^3} \left| \langle \mathbf{q}, 0 | \hat{V}_\lambda^- | i, 1 \rangle \right|^2.$$

Используя явный вид оператора взаимодействия

$$\hat{V}_\lambda^- = \frac{e}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{L^3\omega}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} (-i\hbar\mathbf{e}_\lambda \nabla) \hat{a}_\lambda,$$

получим выражение для вероятности фотоэффекта в виде

$$dP_{fi} = \frac{e^2 p}{2\pi\hbar m \omega L^3} \left| \iint e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\mathbf{q}\mathbf{r})} (\mathbf{e}_\lambda \nabla) \psi_i(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \right|^2 d\Omega. \quad (16.65)$$

Очевидно, это выражение явно зависит от нормировочного объема L^3 для фотонов. Удобнее вычислять величину сечения перехода, равную отношению вероятности перехода к плотности потока фотонов $L^{-3}c$. Вычислим сечение фотоэффекта для атома водорода в основном состоянии. ВФ начального состояния имеет вид

$$\psi_i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}.$$

Введем обозначение \mathfrak{e} для волнового вектора переданного импульса:

$$\mathfrak{e} = \mathbf{k} - \mathbf{q}.$$

Проводя в формуле (16.65) интегрирование по частям и учитывая поперечность поля, найдем

$$\left| \int e^{i\mathfrak{e}\mathbf{r}} (\mathbf{e}_\lambda \nabla) \psi_i d\mathbf{r} \right| = \left| \mathbf{e}_\lambda \mathbf{q} \int \psi_i e^{-i\mathfrak{e}\mathbf{r}} d\mathbf{r} \right|. \quad (16.66)$$

Интеграл вычисляется элементарно в сферических координатах:

$$\frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \int \exp\left(-\frac{r}{a_0} + i\mathfrak{e}r \cos\theta\right) \cdot 2\pi \sin\theta r^2 dr d\theta = \frac{8\sqrt{\pi} a_0^{3/2}}{(1 + a_0^2 \mathfrak{e}^2)^2}. \quad (16.67)$$

Обозначим через θ угол между направлениями импульсов фотона \mathbf{k} и электрона \mathbf{q} , а через φ — угол между плоскостями $\mathbf{k}\mathbf{q}$ и $\mathbf{e}\mathbf{k}$. Тогда

$$\begin{aligned} e\mathbf{q} &= q^2 \sin^2\theta \cos^2\varphi, \\ \mathfrak{e}^2 &= q^2 \left(1 - 2\frac{k}{q} \cos\theta + \frac{k^2}{q^2}\right). \end{aligned}$$

Если энергия электрона в конечном состоянии много больше энергии связи:

$$\frac{\hbar^2 q^2}{2m} \gg \frac{e^4 m}{\hbar^2},$$

то волновой вектор электрона много больше обратного боровского радиуса:

$$q^2 a_0^2 \gg \frac{e^2 m a_0^2}{\hbar^2} = 1. \quad (16.68)$$

Далее, учитывая, что волновой вектор фотона $k = \omega c^{-1}$, имеем

$$\frac{k}{q} = \frac{\omega}{cq} \approx \frac{\hbar q}{2mc}.$$

В нерелятивистском приближении можно ограничиться членами $\sim \hbar q/mc$. Тогда, пренебрегая в знаменателе формулы (16.67) единицей в силу неравенства (16.68), получаем

$$d\sigma_f = 32\alpha \frac{\hbar}{m a_0^5 k q c} \frac{\sin^2\theta \cos^2\varphi}{(1 - (\hbar q/mc) \cos\theta)^4} d\Omega. \quad (16.69)$$

Угловая зависимость в числителе показывает, что наиболее вероятно испускание электрона в направлении электрического поля падающей волны. Отметим, что при выводе формулы (16.69) мы не использовали разложение экспоненты в операторе взаимодействия, а поэтому учли все порядки мультипольности перехода. Проводя вычисление в дипольном приближении, что эквивалентно замене

$$\mathfrak{e} = \mathbf{q}, \quad \mathbf{k} = 0,$$

мы получим вместо углового фактора в знаменателе (16.68) единицу.

В этом случае можно провести интегрирование по углам и получить явный вид полного сечения:

$$\sigma = \frac{2^8 \pi}{3} \alpha a_0^2 \left(\frac{I}{E} \right)^{7/2}, \quad (16.70)$$

где $E = \hbar\omega$ — энергия фотона. Подчеркнем, что наше приближение пригодно лишь при $E \gg I$. Вблизи красной границы фотоэффекта нужно пользоваться точными ВФ электрона в кулоновском поле. Соответствующие расчеты показывают, что учет взаимодействия в конечном состоянии приводит к появлению в формуле для сечения дополнительного множителя

$$F(\xi) = 2\pi \sqrt{\frac{I}{E}} \frac{\exp(-4\xi \operatorname{arccotg} \xi)}{1 - \exp(-2\pi\xi)}, \quad \xi = \sqrt{\frac{I}{E-I}}$$

Множитель $F(\xi)$ уменьшает сечение фотоэффекта вблизи красной границы. При $E = I$ $F(\xi) = 2\pi e^{-4} = 0,12$ и медленно возрастает с увеличением энергии E . Даже при $E = 50I$ значение $F(\xi)$ составляет всего 0,66.

Отметим, что сечение ионизации на красной границе имеет конечную величину. Это связано со специфическим поведением кулоновских ВФ непрерывного спектра на больших расстояниях. Для частиц, связанных короткодействующими потенциалами, при $E = I$ сечение фотоэффекта обращается в нуль. На рис. 45 показана зависимость сечений от E/I для атома H_1 и отрицательного иона H_1^- . Отметим также степенной характер убывания сечения при $E \rightarrow \infty$.

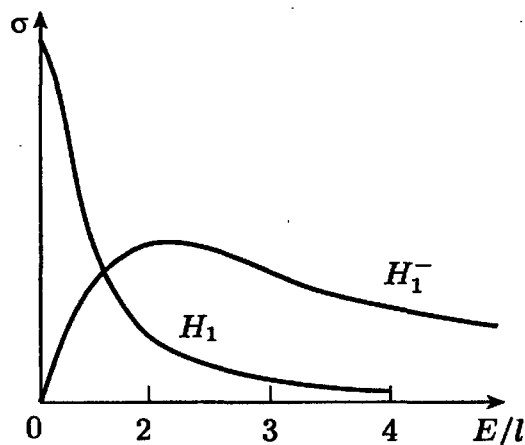


Рис. 45

14. Выше мы рассматривали однофотонные процессы, в которых начальное состояние системы принадлежало дискретному спектру. Если начальное состояние электрона принадлежит непрерывному спектру, а фотонов в начальном состоянии нет, то возможны два типа однофотонных процессов.

Конечное состояние электрона может принадлежать дискретному спектру, а конечное состояние поля будет содержать один фотон. Такой процесс — рекомбинация — противоположен фотоэффекту. Его сечение определяется матричным элементом (16.66). Конечное состояние электрона может принадлежать непрерывному спектру, а конечное состояние поля будет содержать один фотон. Такой процесс неупругого рассеяния называется *тормозным излучением*.

Рассмотрим тормозное излучение электрона в кулоновском поле ядра. Вместо использования точных ВФ непрерывного спектра мы, как и в п. 16.13, будем описывать начальное и конечное состояния электрона ВФ свободного движения с определенным импульсом

$$\psi_i = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}, \quad \psi_f = \frac{1}{\sqrt{L^3}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}},$$

а влияние кулоновского поля ядра учтем как возмущение

$$\hat{V}_N = -\frac{Ze^2}{r}.$$

Матричный элемент оператора взаимодействия с полем \hat{V}_F между функциями ψ_i и ψ_f обращается в нуль: свободный электрон не излучает. Отличный от нуля вклад возникает только во втором порядке теории возмущений от члена первого порядка по \hat{V}_N и по \hat{V}_F :

$$\langle f|\hat{H}|i\rangle = \sum_{ab} \left(\frac{\langle f|\hat{V}_N|a\rangle\langle a|\hat{V}_F|i\rangle}{E_i - E_a} + \frac{\langle f|\hat{V}_F|b\rangle\langle b|\hat{V}_N|i\rangle}{E_i - E_a} \right). \quad (16.71)$$

Матричные элементы операторов \hat{V}_N и \hat{V}_F вычисляются элементарно:

$$\langle \mathbf{b}|\hat{V}_N|\mathbf{p}\rangle = -\frac{4\pi Ze^2}{L^3} \frac{1}{|\mathbf{p} - \mathbf{b}|^2}, \quad (16.72)$$

$$\langle \mathbf{b}, \mathbf{k}|\hat{V}_F|\mathbf{p}, 0\rangle = -\frac{e\hbar}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{L^3\omega}} \mathbf{e}_\lambda \mathbf{p} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{b} - \mathbf{k}). \quad (16.73)$$

Энергии начального и конечного состояний определяются импульсами соответствующих свободных частиц:

$$E_i = \frac{\hbar^2 \mathbf{p}^2}{2m}, \quad E_f = \frac{\hbar^2 \mathbf{q}^2}{2m} + \hbar c k.$$

Учитывая закон сохранения импульса, имеющий место при взаимодействии с квантовым полем, энергии промежуточных состояний можно выразить через импульсы \mathbf{p} , \mathbf{q} , \mathbf{k} :

$$E_a = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{q} + \mathbf{k})^2, \\ E_b = \frac{\hbar^2}{2m} \left[(\mathbf{p} - \mathbf{k})^2 + \frac{2mc}{\hbar} k \right].$$

Подставляя выражения (16.72), (16.73) в матричный элемент (16.71), получим

$$\langle f|\hat{V}|i\rangle = \frac{4\pi Ze^2}{L^3} \frac{e\hbar}{m} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{L^3\omega}} \frac{1}{|\mathbf{p} - \mathbf{q} - \mathbf{k}|^2} \left[\frac{(\mathbf{e}_\lambda \mathbf{p})}{E_i - E_a} + \frac{(\mathbf{e}_\lambda \mathbf{q})}{E_i - E_b} \right]. \quad (16.74)$$

Направления импульсов фотона \mathbf{k} и электрона \mathbf{p} в конечном состоянии независимы. Поэтому функция плотности конечных состояний может быть представлена как произведение плотностей состояний для фотона и свободного электрона:

$$\rho dE = \frac{m\hbar q}{8\pi^3\hbar^3} L^3 d\Omega_e \frac{\hbar^2 k^2}{8\pi^3\hbar^3 c} L^3 d\Omega_p \hbar c dk.$$

Определим дифференциальное сечение тормозного излучения как отношение вероятности перехода к плотности потока начальных электронов: $p\hbar m^{-1} L^{-3}$. Используя золотое правило, получим

$$d\sigma = \alpha \frac{Z^2 e^4}{\pi^2} \left| \frac{qk}{p} \right| \frac{1}{|\mathbf{p} - \mathbf{q} - \mathbf{k}|^4} \left[\frac{\mathbf{e}_\lambda \mathbf{p}}{E_i - E_a} + \frac{\mathbf{e}_\lambda \mathbf{q}}{E_i - E_b} \right]^2 d\Omega_e d\Omega_p. \quad (16.75)$$

Найдем выражение для энергетического спектра испускаемых фотонов. Для этого надо формулу (16.75) просуммировать по возможным направлениям поляризации \mathbf{e}_λ и проинтегрировать по угловым переменным.

Введем систему координат с осью Oz вдоль \mathbf{p} и плоскостью Oxz , совпадающей с плоскостью $\mathbf{p}\mathbf{k}$ (рис. 46). Тогда компоненты векторов \mathbf{p} , \mathbf{q} , \mathbf{k} будут определяться выражениями

$$\mathbf{p} = p(0, 0, 1),$$

$$\mathbf{k} = k(\sin \theta, 0, \cos \theta),$$

$$\mathbf{q} = q(\sin \alpha \cos \beta, \sin \alpha \sin \beta, \cos \alpha).$$

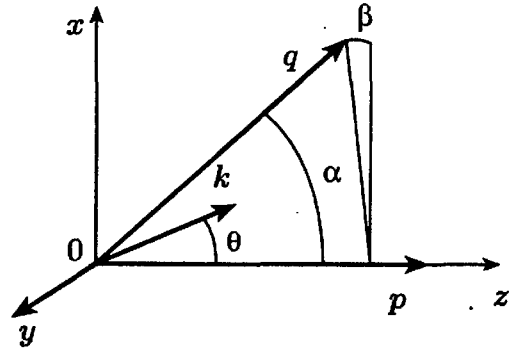


Рис. 46

Вектор поляризации \mathbf{e}_λ ортогонален импульсу фотона \mathbf{k} , потому удобно положить

$$\mathbf{e}_1 = (-\cos \theta, 0, \sin \theta), \quad \mathbf{e}_2 = (0, 1, 0).$$

В нерелятивистском приближении формулу (16.75) можно упростить, воспользовавшись, как и в п. 16.13, малостью импульса фотона. Тогда

$$E_i - E_a = \frac{\hbar^2}{2m} (p^2 - q^2 - 2\mathbf{q}\mathbf{k} - k^2) \approx \frac{\hbar^2}{2m} (p^2 - q^2),$$

$$E_i - E_b = \frac{\hbar^2}{2m} \left(-2\frac{mc}{\hbar}k + 2\mathbf{q}\mathbf{k} - k^2 \right) \approx \frac{\hbar^2}{2m} (q^2 - p^2), \quad (16.76)$$

$$|\mathbf{p} - \mathbf{q} - \mathbf{k}|^4 \approx (\mathbf{p} - \mathbf{q})^4 = (p^2 + q^2 - 2pq \cos \alpha)^2.$$

Энергетические знаменатели в квадратной скобке формулы (16.75) различаются только знаками и не содержат угловых множителей. Поэтому мы можем ограничиться рассмотрением угловой зависимости числителей. Для различных значений поляризации имеем

$$\begin{aligned}\alpha = 1: (\mathbf{e}_1\mathbf{p} - \mathbf{e}_1\mathbf{q}) &= -p \sin \theta + q (\sin \theta \cos \alpha - \cos \theta \sin \alpha \sin \beta), \\ \alpha = 2: (\mathbf{e}_2\mathbf{p} - \mathbf{e}_2\mathbf{q}) &= -q \sin \alpha \sin \beta.\end{aligned}$$

Возводя эти функции в квадрат, складывая и интегрируя по θ и β , получим

$$2\pi \int d\beta \int d \cos \theta \sum_{\lambda} (\mathbf{e}_{\lambda}\mathbf{p} - \mathbf{e}_{\lambda}\mathbf{q})^2 = \frac{16\pi^2}{3} (q^2 + p^2 - 2pq \cos \alpha).$$

Оставшееся интегрирование по α также выполняется элементарно:

$$d\sigma(k) = Z^2 \alpha^3 \frac{16}{3} \frac{q}{p} \frac{dk}{k} \int_{-1}^{+1} \frac{d \cos \alpha}{p^2 + q^2 - 2pq \cos \alpha}.$$

Отсюда находим окончательный результат:

$$d\sigma(k) = \frac{16}{3} Z^2 \alpha^3 \frac{1}{p^2} \ln \left[\frac{p+q}{p-q} \right] \frac{dk}{k}. \quad (16.77)$$

Введем безразмерную величину η , равную отношению энергий фотона $\hbar ck$ и начального электрона E_i :

$$\eta = k \frac{2mc}{\hbar p^2}.$$

Тогда выражение можно представить в виде

$$d\sigma(\eta) = \frac{16}{3} Z^2 \alpha^3 \frac{1}{p^2} \ln \left(\frac{1 + \sqrt{1 - \eta}}{1 - \sqrt{1 - \eta}} \right) \frac{d\eta}{\eta}.$$

Логарифмический множитель при не слишком малых η меняется медленно, и зависимость сечения от энергии определяется главным образом множителем η^{-1} . Спектральная интенсивность тормозного излучения определяется выражением

$$dS(\omega) = \frac{16}{3} Z^2 \alpha^3 \frac{\hbar}{p^2} \ln \left(\frac{1 + \sqrt{1 - \eta}}{1 - \sqrt{1 - \eta}} \right) d\omega. \quad (16.78)$$

Зависимость спектральной интенсивности от η показана на рис. 47. Отметим логарифмический рост $S(\omega)$ при $\omega \rightarrow 0$. Такое поведение

характерно для чисто кулоновского потенциала. Отметим, что при $\omega \rightarrow 0$ матричные элементы возмущений (16.72), (16.73) становятся большими, а энергетические знаменатели в (16.74), напротив, малы. Таким образом, в этом случае нарушаются условия применимости теории возмущений.

15. Выше мы рассматривали одно-квантовые процессы, в которых начальное и конечное состояния поля отличались значениями только одного из чисел заполнения. Сечения таких процессов определялись в первом порядке теории возмущений по полю

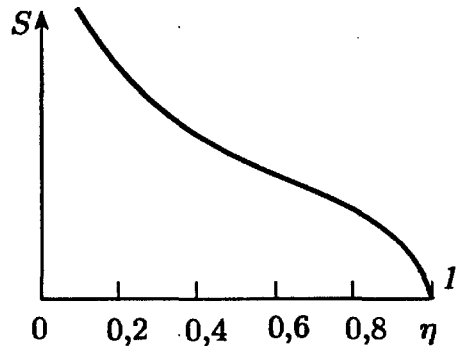


Рис. 47

матричным элементом возмущения, линейного по оператору \hat{A} . В нерелятивистском приближении возможны следующие двухквантовые процессы: двухфотонное поглощение (в начальном состоянии — два фотона, в конечном — фотонов нет), двухфотонное излучение (в конечном состоянии — два фотона, в начальном — фотонов нет) и рассеяние (в начальном и конечном состоянии — по одному фотону с различными, вообще говоря, квантовыми числами).

Рассмотрим рассеяние фотонов свободными электронами. В этом случае в первом порядке теории возмущений отличный от нуля вклад дает только второе слагаемое в операторе возмущения в (16.32):

$$\hat{V}_2 = \frac{e^2}{2mc^2} \hat{A}^2.$$

Здесь для \hat{A} должно быть взято выражение (16.28). Выбирая ВФ электрона в начальном и конечном состояниях в виде плоских волн, как в п. 16.14, и обозначая через \mathbf{b} , \mathbf{e}_i и \mathbf{k} , \mathbf{e}_f импульсы и поляризации фотона в начальном и конечном состояниях, запишем матричный элемент перехода:

$$\langle f | \hat{V}_2 | i \rangle = \frac{e^2}{2mc^2} \int \frac{2\pi\hbar c \cdot 2}{L^3 \sqrt{bk}} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_f e^{i(\mathbf{p} + \mathbf{b} - \mathbf{q} - \mathbf{k})\mathbf{r}} d\mathbf{r}.$$

Интеграл отличен от нуля только при условии

$$\mathbf{k} + \mathbf{q} = \mathbf{p} + \mathbf{b}$$

и вычисляется в этом случае элементарно:

$$\langle f | \hat{V}_2 | i \rangle = \frac{e^2 \cdot 2\pi\hbar}{mcL^3} \frac{\mathbf{e}_i \mathbf{e}_f}{\sqrt{bk}}.$$

Нашей конечной целью является вычисление сечения рассеяния фотона. Дифференциальное сечение рассеяния определяется золотым

правилом:

$$d\sigma(\mathbf{k}, \alpha) = \frac{L^3}{c} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle f | \widehat{V}_2 | i \rangle \right|^2 \rho(E_f), \quad (16.79)$$

где плотность конечных состояний

$$\rho(E_f) = \frac{L^3 k^2 d\Omega}{8\pi^3} \frac{dk}{dE_f}. \quad (16.80)$$

При заданных \mathbf{b} и \mathbf{p} величина и направление импульса фотона в конечном состоянии связаны углом рассеяния θ между направлениями \mathbf{b} и \mathbf{k} . Примем для простоты, что в начальном состоянии электрон покоится: $\mathbf{b} = 0$. Тогда из закона сохранения энергии следует равенство

$$\hbar c b = \hbar c k + \frac{\hbar^2 q^2}{2m} = \hbar c \left[k + \frac{\lambda}{2} (\mathbf{k} - \mathbf{b})^2 \right], \quad (16.81)$$

где введена величина

$$\lambda = \frac{\hbar}{mc} = 3,86 \cdot 10^{-11} \text{ см},$$

называемая *комптоновской длиной волны* электрона.

Дифференцируя формулу (16.81) по k , найдем входящую в выражение для плотности конечных состояний величину:

$$\frac{dk}{dE_f} = \left(\frac{dE_f}{dk} \right)^{-1} = \{ \hbar c [1 + \lambda (b - k \cos \theta)] \}^{-1}. \quad (16.82)$$

Рассмотрим произведение векторов поляризации $\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$. В качестве базисных направлений удобно выбрать вектор \mathbf{e}_1 в плоскости $\mathbf{b}\mathbf{k}$, а вектор \mathbf{e}_2 — перпендикулярным этой плоскости. Тогда отличны от нуля будут только произведения

$$\mathbf{e}_1^i \mathbf{e}_1^j = \cos \theta, \quad \mathbf{e}_2^i \mathbf{e}_2^j = 1.$$

Если начальный фотон не поляризован, то формулу (16.82) следует усреднить по поляризациям. Это приводит к появлению в выражении для сечения множителя

$$\overline{(\mathbf{e}^i \mathbf{e}^j)^2} = \frac{1}{2} (1 + \cos^2 \theta).$$

Итак, для усреднения по поляризациям дифференциального сечения рассеяния получаем формулу

$$d\sigma(k) = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \left[\frac{k^2}{1 + \lambda (k - b \cos \theta)} \right] \frac{1}{2} \frac{1 + \cos^2 \theta}{kb} d\Omega. \quad (16.83)$$

Учитывая малость величины $k\lambda$ в нерелятивистской области, можно разложить b по этому параметру. Сохраняя члены первого порядка по $k\lambda$, получаем

$$d\sigma(k) \approx \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 [1 - 2k\lambda (1 - \cos \theta)] \frac{1 + \cos^2 \theta}{2} d\Omega.$$

Интегрирование по угловым переменным элементарно. Полное сечение рассеяния имеет вид

$$\sigma = \frac{8\pi}{3} r_0^2 (1 - 2k\lambda) = \sigma_T (1 - 2k\lambda).$$

Здесь σ_T есть классическое томсоновское сечение рассеяния свободными электронами. Квантовая поправка уменьшает сечение с ростом энергии фотона *.

ЗАДАЧИ

1. Показать, что в дипольном приближении в системе двух тождественных заряженных частиц излучения нет. Аналогичное утверждение имеет место и в классической электродинамике: для двух частиц с одинаковыми e и m дипольное излучение невозможно.

2. Доказать, что переход из s -состояния в s -состояние запрещен во всех порядках мультиплетности.

3. Найти зависимость от N вероятности дипольного перехода между состояниями частицы в кулоновском поле с главными квантовыми числами n и N при $N \rightarrow \infty$.

4. Определить зависимость сечения рекомбинации электрона в состояние $1s$ атома водорода от начального импульса электрона.

НЕКОТОРЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ

Постоянно используются сокращения: ВФ — волновая функция, СЗ — собственное значение, СФ — собственная функция, УШ — уравнение Шредингера, ФГ — функция Грина.

Операторы:

Операторы обозначаются значком $\hat{}$ над буквой. Постоянно используются обозначения:

\hat{a}^+, \hat{a} — операторы Бозе;

\hat{c}^+, \hat{c} — операторы Ферми;

\hat{H} — гамильтониан;

\hat{j}, \hat{J} — полный момент частицы, системы;

\hat{l}, \hat{L} — орбитальный момент частицы, системы;

\hat{p} — импульс;

\hat{s}, \hat{S} — спиновый момент частицы, системы;

Параметры:

a — характерная длина потенциала;

k — волновое число;

E — энергия;

U_0 — характерная величина потенциала;

Z — заряд ядра в атомных единицах;

Константы:

a_0 — боровский радиус $= \hbar^2/m_e e^2 = 5,292 \cdot 10^{-9}$ см;

c — скорость света $= 2,99793 \cdot 10^{10}$ см/с;

e — заряд электрона $= 4,803 \cdot 10^{-10}$ ед. СГСЭ;

m_e — масса электрона $= 9,109 \cdot 10^{-28}$ г;

m_p — масса протона $= 1,673 \cdot 10^{-24}$ г;

\hbar — постоянная Планка $= 1,054 \cdot 10^{-27}$ эрг·с;

α — постоянная тонкой структуры $= e^2/\hbar c, 1/\alpha = 137,04$.

ПРИМЕЧАНИЯ

К стр. 5. Приведенные в первой главе определения и формулировки теорем достаточны для понимания дальнейшего изложения.

Более строгое и последовательное изложение можно найти в книгах:

Н. И. Ахиезер, И. М. Глазман. Теория линейных операторов в гильбертовом пространстве. — М.: Наука, 1966.

Ф. Рисс, Б. Секефальви-Надь. Лекции по функциональному анализу. — М.: ИЛ, 1954.

Изложение математического аппарата, тесно связанное с задачами квантовой механики, можно найти в книге:

П. А. М. Дирак. Принципы квантовой механики. — М.: Физматгиз, 1960.

К стр. 7. Приведенное определение δ -функции достаточно для целей дальнейшего изложения. Теорию см. в книге:

В. С. Владимиров. Уравнения математической физики. — М.: Наука, 1971.

К стр. 7. В дальнейшем мы будем считать, что рассматриваемые функции дифференцируемы необходимое число раз.

К стр. 30. Отметим, что равенство

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}_i} = \frac{i}{\hbar} [\hat{p}_i, \hat{H}]$$

является следствием одних только коммутационных соотношений и поэтому выполняется в любом представлении.

К стр. 44. Другие примеры применения метода факторизации можно найти в книге:

Х. Грин. Матричная квантовая механика. — М.: Мир, 1968.

К стр. 57. Теорию когерентных состояний можно найти, например, в книге:

Дж. Клаудер, Э. Сударшан. Основы квантовой оптики. — М.: Мир, 1970.

К стр. 83. Гипергеометрическим называется уравнение

$$z(1-z) \frac{d^2u}{dz^2} + [c - (a+b+1)] \frac{du}{dz} - abu = 0,$$

где a , b и c — любые комплексные числа. Если c не равно нулю или отрицательному целому числу, то одно из его решений, регулярное в нуле, есть гипергеометрическая функция $F(a, b, c, z)$ (иногда обозначается как ${}_2F_1$), которая определяется рядом

$$F = 1 + \frac{ab}{c} \frac{z}{1!} + \frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)} \frac{z^2}{2!} + \dots$$

Второе независимое решение есть

$$u_2(z) = z^{1-c} F(a-c+1, b-c+1, 2-c, z).$$

Свойства гипергеометрической функции подробно описаны в книге:

Г. Бейтман, А. Эрдейн. Высшие трансцендентные функции. Том I. Гипергеометрическая функция. Функция Лежандра. — М.: Наука, 1965.

Вырожденное гипергеометрическое уравнение имеет вид

$$x \frac{d^2y}{dx^2} + (c-x) \frac{dy}{dx} - ay = 0.$$

Если c не есть целое число, то общее решение этого уравнения имеет вид

$$y = A_1 F(a, c; x) + A_2 x^{1-c} F(a-c+1, 2-c, x).$$

Регулярное в нуле решение есть вырожденная гипергеометрическая функция $F(a, c, x)$ (иногда обозначается как ${}_1F_1$ или Φ). Свойства этой функции подробно рассмотрены в главе 6 указанной книги.

К стр. 122. В. П. Маслов. Теория возмущений и асимптотические методы. — М.: Изд-во МГУ, 1965.

К стр. 130. Задача о надбарьерном отражении частиц высокой энергии решена в работе:

В. Л. Покровский, И. М. Халатников // ЖЭТФ (1961). Т. 40. С. 1713.

К стр. 135. Для подсчета числа узловых поверхностей угловую часть ВФ $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ следует выбрать действительной, опустив множитель i^l в формуле (4.28) и заменив СФ оператора проекции момента $e^{im\varphi}$ для $m = \pm |m|$ их действительными линейными комбинациями $\cos m\varphi$ и $\sin m\varphi$. Такая угловая функция $Y_{l|m|}$ обращается в нуль на $|m|$ плоскостях, проходящих через ось сферической системы координат, и на $l - |m|$ конических поверхностях. Подробнее см. Дополнение 2 в книге:

А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. Уравнения математической физики. — М.: Наука, 1966.

Итак, полное число узловых поверхностей для ВФ стационарного состояния есть

$$N = n_r + (l - |m|) + |m| = n - l;$$

в параболических координатах

$$N = n_1 + n_2 + |m|.$$

Сравнение двух выражений для N и дает формулу (8.8).

К стр. 137. Более подробное рассмотрение эффекта Штарка для атома водорода можно найти в книге:

Г. Бете, Е. Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. — М.: Физматгиз, 1960.

К стр. 148. Математический аппарат теории потенциального рассеяния изложен в книге:

В. де Альфаро, Т. Редже. Потенциальное рассеяние. — М.: Мир, 1966.

К стр. 154. Приближение Мольера называется также приближением Глаубера, дифракционным приближением и эйкональным приближением. Применениям этого метода посвящен обзор:

Р. Глаубер // УФН (1971). Т. 103, В. 4, С. 641,

К стр. 193. В этом пункте мы следуем изложению метода Г. Ф. Друкарева в книге:

А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. — М.: Наука, 1971.

Глава 7 этой книги представляет подробный обзор теории квазистационарных состояний.

К стр. 199. Материал, дополняющий содержание этой и других глав (в частности, 7 и 14), можно найти в книге:

А. Б. Мигдал. Качественные методы в квантовой теории, — М.: Наука, 1975.

К стр. 204. *С. М. Рытов.* Введение в статистическую радиофизику. — М.: Наука, 1966.

К стр. 235. Гамильтониан (13.39) носит название гамильтониана Гайзенберга–Дирака–Ван-Флека и играет важную роль в теории магнетизма. См., например,

Д. Маттис, Теория магнетизма. — М.: Мир, 1967.

К стр. 246, 248. Доказательства этих утверждений можно найти в книге:

Г. Бете. Квантовая механика. — М.: Мир, 1967.

К стр. 275. Поскольку спектр фотонов в кубе дискретен и возможные значения каждой из компонент волнового вектора есть $k_i = 2\pi n_i L^{-1}$, то плотность фотонных состояний в пространстве волновых векторов есть $(L/2\pi)^3$.

К стр. 293. Рассеяние в релятивистском случае и большое число других задач рассматривается в книге:

В. Гайтлер. Квантовая теория излучения. — М.: ИЛ. 1956.

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Амплитуда рассеяния 148
Ангармонический осциллятор 104
Баргмана неравенство 94
Блоха теорема 36
Бозе операторы 21, 43
Борновский параметр 40
Борновское приближение 152
Боровский радиус 82
Бриллюэна–Вигнера теория возмущений 102
Вакуумное состояние 227
Ван-дер-Ваальса силы 143
Вариационный принцип 105
Вероятность перехода 190
Вигнера формула 169
Виртуальные состояния 170
Внезапные переходы 191
Волновое число 48
Волновой вектор 147
— пакет 192
Вырождение случайное 84
Вырождения кратность 11
Гайзенберга представление 30
— уравнения 30
Гайтлера–Лондона метод 267
Гармонический осциллятор 43
Гейгера–Неттола закон 199
Гильбертово пространство 8
Дельта-функция 7
Дипольное электрическое излучение 277
Дирака уравнение 179
Дифференциальное сечение рассеяния 149
Длина рассеяния 159
Зеемана эффект 253
Золотое правило Ферми 207
Инверсия 67
Квадрупольное излучение 282
Квазистационарное состояние 171
Квазиимпульс 36
Кембла приближение 129
Когерентные состояния 57
Коммутатор 6
Комптоновская длина волны 290
Коэффициент отражения 49
— прохождения 49
Крамерса формула 94
Лангера преобразование 133
Ландау уровни 214
Ланде множитель 253
Линейных комбинаций метод 110
Магнитное излучение 281
Максвелла уравнения 269
Матрица плотности 86
Матричный элемент 9
Мольера приближение 154
Мультиплетность термина 247
Обменный интеграл 226
Оптическая теорема 149
Орбитальный момент 62
Осцилляционная теорема 39
Отталкивание уровней 102
Парциальные сечения 158
Паули матрицы 22
— принцип 225
— уравнение 184
Пашена–Бака эффект 254
Плотность потока 34
Поляризуемость 138
Пономарева преобразование 131
Постоянная тонкой структуры 186

- Потенциал эффективный 80
 Правила отбора 279
 Правило квантования Бора–Зомерфельда 122
 Представление чисел заполнения 227
 Радиус эффективный 161
 Рамзауэра эффект 164
 Рассела–Саундерса случай 252
 Рунге–Ленца вектор 84
 Рэлея–Шредингера теория возмущений 96
 Самосогласованное поле 244
 Сверхтонкая структура 220
 Секулярное уравнение 100
 Сечение рассеяния 148
 След матрицы 20
 Собственные значения 10
 — функции 10
 Соотношение неопределенностей 56
 Спектр оператора 13
 Спин 68
 Спин-орбитальное взаимодействие 186
 Спиральность 181
 Спонтанное излучение 276
 Стационарные состояния 32
 Стокса линии 119
 — параметры 119
 Теорема вириала 32
 Томаса–Ферми уравнение 257
 Тонкая структура 188
 Тормозное излучение 287
 Унитарное преобразование 12
 Унитарный оператор 11
 Факсена–Хольтсмарка формула 157
 Ферми операторы 21
 Форма линии 284
 Фотоны 272
 Фотоэффект 285
 Функция Грина 51
 Хартри–Фока уравнения 243
 Хединга правило 126
 Хеллмана–Фейнмана теорема 41
 Хунда правило 248
 Ширина резонанса 172
 Шредингера уравнение 30
 — представление 30
 Штарка эффект 134
 Штерна–Герлаха опыт 218
 Эйлера углы 71
 Электронная конфигурация 245
 — оболочка 245
 Энергетический спектр 32
 Эрмитов оператор 9

Учебное издание

Павел Вячеславович Елютин
Владимир Дмитриевич Кривченков

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА С ЗАДАЧАМИ

Редакторы *В.А. Иванов, Д.А. Миртова*
Оригинал-макет *Е.Ю. Морозова*

ЛР № 071930 от 06.07.1999. Подписано в печать 08.11.2000.
Формат 60х90/16. Бумага типографская № 2. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 19. Уч.-изд. л. 20,9. Тираж 3000 экз. Заказ № 613.

Издательская фирма «Физико-математическая литература»
МАИК «Наука/Интерпериодика»
117864 Москва, Профсоюзная ул., 90

Отпечатано с готовых диапозитивов в Московской типографии № 6
Министерства РФ по делам печати, телерадиовещания
и средств массовых коммуникаций
109088 Москва, Ж-88, Южнопортовая ул., 24

ISBN 5-9221-0077-7



9 785922 100779