

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

В. Г. Сербо, И. Б. Хриплович

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Учебное пособие

Второе издание, исправленное

Новосибирск
2010

УДК 530.145
ББК В318
С32

Сербо В. Г., Хриплович И. Б. Квантовая механика: Учеб. пособие/
Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2010. 274 с.
ISBN 978-5-94356-883-1

Пособие предназначено для студентов 3-го курса физического факульте-
та. Содержание соответствует курсу “Квантовая механика”. Пособие может
также оказаться полезным и для студентов других факультетов НГУ.

Рецензент
проф. А. И. Мильштейн

Издание подготовлено в рамках выполнения инновационно-
образовательной программы “*Инновационные образовательные программы
и технологии, реализуемые на принципах партнерства классического
университета, науки, бизнеса и государства*” национального проекта
“Образование”.

© Новосибирский государственный
университет, 2008
© Сербо В. Г., Хриплович И. Б., 2008
© Новосибирский государственный
университет, 2010
© Сербо В. Г., Хриплович И. Б., 2010

ISBN 978-5-94356-883-1

Оглавление

Предисловие	6
I. ВВЕДЕНИЕ	9
§ 1. Первые квантовомеханические понятия	9
§ 2. Соотношение неопределённостей. Оценки	15
§ 3. Координатное и импульсное представления. Операторы фи- зических величин	17
II. УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА. ОПЕРАТОРЫ	22
§ 4. Оператор Гамильтона. Уравнение Шрёдингера	22
§ 5. Стационарное уравнение Шрёдингера. Одномерный случай	24
§ 6. Эрмитовы операторы	30
§ 7. Линейный осциллятор	33
§ 8. Эволюция волновой функции со временем	40
§ 9. Плотность тока	42
§ 10. Одномерное рассеяние	43
§ 11. Коммутаторы	47
§ 12. Производная от оператора по времени. Теорема Эренфеста	51
§ 13. Теорема о вириале	53
§ 14. Гайзенберговское представление	55
§ 15. Уравнение Шрёдингера для частицы в электромагнитном поле	59
§ 16. Оператор сдвига. Периодическое поле. Теорема Блоха	61
§ 17. Пример: периодическое поле дельта ям	64
§ 18. Квазиклассическое приближение	69
§ 19. Правила квантования Бора – Зоммерфельда	72
§ 20. Подбарьерное прохождение. Двойная яма	76
§ 21. Квазистационарные состояния	78
§ 22. Модель α -распада	82

III. МОМЕНТ ИМПУЛЬСА. ЦЕНТРАЛЬНОЕ ПОЛЕ	85
§ 23. Момент импульса	85
§ 24. Движение в центральном поле	94
§ 25. Атом водорода	99
IV. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ	109
§ 26. Стационарная теория возмущений. Невырожденный случай	109
§ 27. Производная от энергии по параметру	112
§ 28. Поляризуемость атома	114
§ 29. Силы Ван-дер-Ваальса	115
§ 30. Стационарная теория возмущений при наличии вырождения	118
§ 31. Эффект Штарка для атома водорода при $n = 2$	120
V. ТЕОРИЯ РАССЕЙЯНИЯ	121
§ 32. Постановка задачи рассеяния. Амплитуда рассеяния	121
§ 33. Борновское приближение. Формула Резерфорда. Атомный формфактор	124
§ 34. Фазовая теория рассеяния	131
VI. СПИН	142
§ 35. Опыт Штерна – Герлаха	142
§ 36. Спин и спиноры	144
§ 37. Уравнение Паули	149
VII. СЛОЖЕНИЕ МОМЕНТОВ	154
§ 38. Сложение моментов	154
§ 39. Правила отбора для матричных элементов скалярных и векторных операторов	159
§ 40. Усреднение векторного оператора	162
VIII. РЕЛЯТИВИСТСКАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА	165
§ 41. Тожественность частиц. Принцип Паули	165
§ 42. Уравнение Клейна – Фока – Гордона	167
§ 43. Симметричная форма уравнения Дирака	171
§ 44. Релятивистская ковариантность уравнения Дирака	176
§ 45. Плотность тока. Зарядовое сопряжение. Отражение времени	178
§ 46. Гамильтонова форма уравнения Дирака	179
§ 47. Свободное движение дираковской частицы	181

§ 48. Нерелятивистский и ультрарелятивистский пределы урав- нения Дирака	185
§ 49. Сходство и различие уравнений Дирака и Клейна – Фока – Гордона	189
§ 50. Рассеяние релятивистского электрона в кулоновском поле	191
§ 51. Тонкая структура уровней атома водорода	192
§ 52. Рождение электрон-позитронных пар постоянным электри- ческим полем	196
IX. АТОМ	201
§ 53. Оценка для атома гелия	201
§ 54. Вариационный принцип	202
§ 55. Самосогласованное поле (метод Хартри – Фока)	205
§ 56. Метод Томаса – Ферми	207
§ 57. Структура гамильтониана атома	212
§ 58. Таблица Менделеева	214
§ 59. Атомные термы	214
§ 60. Атом в магнитном поле	221
§ 61. Сверхтонкая структура (СТС)	223
§ 62. Изотопический сдвиг	226
X. ИЗЛУЧЕНИЕ	230
§ 63. Нестационарная теория возмущений	230
§ 64. Фотоэффект	240
§ 65. Квантование электромагнитного поля	243
§ 66. Испускание и поглощение света	252
§ 67. Лэмбовский сдвиг	259
§ 68. Рассеяние света	263
§ 69. Молекулы	265
ПРИЛОЖЕНИЕ: О ФОРМАЛИЗМЕ КВАНТОВОЙ МЕХА- НИКИ	267
Библиографический список	273

Предисловие

Книга основана на конспекте лекций по годовому курсу квантовой механики. Она отражает наш многолетний опыт чтения лекций и проведения семинаров для студентов 3-го курса физического факультета Новосибирского государственного университета. Мы руководствовались следующими соображениями:

- историческое введение должно быть кратким, с тем чтобы уравнение Шредингера появлялось на второй–третьей лекции;
- новые математические методы излагаются только тогда, когда они требуются для решения новых физических задач;
- релятивистская квантовая механика и, в частности, уравнение Дирака — необходимые элементы образования студентов-физиков, которые должны присутствовать в курсе квантовой механики;
- решение задач по квантовой механике — лучший способ активного усвоения новых понятий, поэтому число семинаров на начальном этапе должно в 1,5 раза превышать число лекций;
- помимо семинаров, существует система заданий: каждый студент в течение семестра должен самостоятельно решить 15–20 задач; эти задачи принимаются преподавателем в дополнительное время в форме беседы со студентом, объясняющим свое решение;
- для развития квантовой интуиции большое значение имеют занятия в терминальном классе, где имеется возможность получения быстрого численного или графического ответа на боль-

шое число достаточно сложных задач по квантовой механике.

Изложение ряда вопросов в книге, на наш взгляд, достаточно оригинально. Стандартный же материал, который можно найти в известных учебниках [1], [4], описан кратко, конспективно. В пособии содержатся те задачи, которые были апробированы на семинарах, часть из них заимствована из известных задачников [2], [3], [5]. Пособие содержит также достаточно трудные задачи (они отмечены звездочкой *), предназначенные, в частности, для самостоятельной работы студентов.

Нумерация формул в пособии содержит две цифры. Например, (3.7) означает формулу (7) из §3. Ссылки на формулы из данного параграфа даются в сокращённом виде без указания номера параграфа.

Единицы:

Всюду, где не оговорено особо, используется абсолютная гауссова система единиц.

В некоторых разделах используется атомная ($\hbar = 1$, $m_e = 1$, $|e| = 1$) или релятивистская ($c = 1$, $\hbar = 1$) системы единиц.

$$1 \text{ эВ} = 1,602 \cdot 10^{-12} \text{ эрг} = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ Дж.}$$

Постоянные:

$$\hbar = 1,055 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с} — \text{постоянная Планка};$$

$$c = 2,998 \cdot 10^{10} \text{ см/с} — \text{скорость света};$$

$$|e| = 4,803 \cdot 10^{-10} \text{ ед. СГС} — \text{элементарный заряд};$$

$$\alpha = e^2/(\hbar c) = 1/137,04 — \text{постоянная тонкой структуры};$$

$$m_e = 0,9109 \cdot 10^{-27} \text{ г} — \text{масса электрона};$$

$$m_p = 1,672 \cdot 10^{-24} \text{ г} — \text{масса протона};$$

$$a_B = \hbar^2/(m_e e^2) = 0,5292 \cdot 10^{-8} \text{ см} — \text{боровский радиус};$$

$$E_{\text{ат}} = m_e e^4/\hbar^2 = 27,21 \text{ эВ} = 4,360 \cdot 10^{-11} \text{ эрг} — \text{атомная единица энергии};$$

$$R_y = E_{\text{ат}}/2 — \text{Ридберг};$$

$$t_{\text{ат}} = \hbar^3/(m_e e^4) = 2,42 \cdot 10^{-17} \text{ с} — \text{атомная единица времени};$$

$\lambda_e = \hbar/(m_e c) = 3,862 \cdot 10^{-11}$ см — приведённая комптоновская длина волны электрона;

$r_e = e^2/(m_e c^2) = 2,818 \cdot 10^{-13}$ см — классический радиус электрона;

$\mu_B = |e| \hbar/(2m_e c) = 5,788 \cdot 10^{-9}$ эВ/Гс — магнетон Бора;

$\mu_n = |e| \hbar/(2m_p c) = 3,152 \cdot 10^{-12}$ эВ/Гс — ядерный магнетон.

Глава I

ВВЕДЕНИЕ

§ 1. Первые квантовомеханические понятия

1.1. Квантовая природа света

Излучение абсолютно чёрного тела. Рассматривается спектральный состав электромагнитного излучения, находящегося в равновесии со стенками полости, поддерживаемыми при постоянной температуре. М. Планк (1900 г.) сумел объяснить экспериментально наблюдаемый спектр излучения в следующих предположениях:

- 1) стенки полости моделируются набором осцилляторов — заряженных частиц, удерживаемых линейными силами вблизи положения равновесия;
- 2) осцилляторы частоты ω поглощают и испускают энергию порциями:

$$E_n = \hbar \omega n,$$

где $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-27}$ эрг·с — квант действия (постоянная Планка), а n — целое число.

Фотоэффект — ионизация атома под действием падающего света; его основные законы; наличие “красной границы”. Предполагая, что электромагнитная волна частоты ω состоит из фотонов γ с энергией $\hbar \omega$, А. Эйнштейн (1905 г.) рассмотрел фотоэффект как процесс $\gamma + A \rightarrow e + A^+$, где A и A^+ — атом и ион.

Закон сохранения энергии для этого процесса имеет вид

$$\hbar\omega = \frac{1}{2}m_e v^2 + I,$$

где I — работа выхода (иначе, энергия ионизации). Отсюда минимальная частота фотона (“красная граница” фотоэффекта) равна

$$\omega_{\min} = \frac{I}{\hbar}.$$

Эффект Комптона. А. Комптон наблюдал изменение длины волны рентгеновского излучения при рассеянии рентгеновских лучей на атомах. Эффект Комптона интерпретируется как рассеяние фотона на атомарном электроны, который можно считать почти свободным: $\gamma + e \rightarrow \gamma + e$ (рис. 1). Электромагнитную волну с частотой ω и волновым вектором \mathbf{k} можно

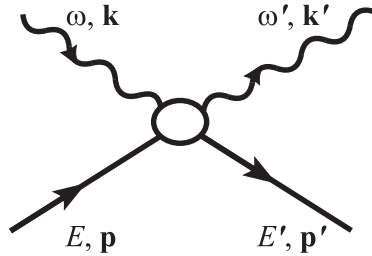


Рис. 1. Кинематика эффекта Комптона

представить как поток фотонов. Рассмотрим фотон как частицу, у которой энергия и импульс определяются соотношениями

$$E_\gamma = \hbar\omega, \quad \mathbf{p}_\gamma = \hbar\mathbf{k},$$

и предположим, что имеют место обычные законы сохранения энергии и импульса для соударения частиц

$$\hbar\omega + E = \hbar\omega' + E', \quad \hbar\mathbf{k} + \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}' + \mathbf{p}'.$$

Покажите, что из этих предположений следует (при условии $E^2 - \mathbf{p}^2 c^2 = m_e^2 c^4$ и $\omega^2 - \mathbf{k}^2 c^2 = 0$), что изменение длины волны рентгеновского излучения при рассеянии на первоначально неподвижном электроны равно

$$\lambda' - \lambda = 4\pi\lambda_e \sin^2 \frac{\theta_\gamma}{2}, \quad \lambda = \frac{2\pi}{k}, \quad \lambda' = \frac{2\pi}{k'},$$

где

$$\lambda_e = \frac{\hbar}{m_e c} = 3,86 \cdot 10^{-11} \text{ см}$$

— (приведённая) комптоновская длина волны электроны. Именно такое изменение длины волны и наблюдал А. Комптоном в 1923 г.

Понятие о нелинейном фотоэффекте и нелинейном эффекте Комптона.

О СВЯЗИ ВОЛНОВОГО И КВАНТОВОГО ОПИСАНИЯ СВЕТА.

При обычной рентгенографии на фотопластинке места большей или меньшей засветки определяются интенсивностью волны, т. е. величиной плотности энергии электромагнитного поля $[\mathbf{E}^2(\mathbf{r}) + \mathbf{B}^2(\mathbf{r})]/(8\pi)$. Но такую же картину можно получить, используя рентгеновский источник низкой интенсивности, регистрируя отдельные фотоны и накапливая информацию. В этом случае нельзя предсказать, где именно будет зарегистрирован отдельный фотон, но можно указать вероятность его регистрации, которая пропорциональна интенсивности электромагнитной волны.

1.2. Волновые свойства частиц

Опыты Э. Резерфорда по рассеянию α -частиц на атомах (1911 г.) привели к планетарной модели атома, в которой размер ядра

$$R_n \sim 10^{-13} \div 10^{-12} \text{ см},$$

а размер электронной оболочки

$$a_{\text{ат}} \sim 10^{-8} \text{ см.}$$

Стабильность и стандартность атомов; противоречия с классической физикой. Полуклассическая модель Н. Бора (1913 г.) для атома водорода.

Гипотеза Л. де Бройля о волновых свойствах частиц (1924 г.) — частице с энергией E и импульсом \mathbf{p} сопоставляется волна с частотой ω и волновым вектором \mathbf{k} :

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}. \quad (1.1)$$

Экспериментальное подтверждение волновых свойств частиц — дифракция электронов, нейтронов, атомов и т. д.

В классической механике состояние частицы описывается заданием координаты $\mathbf{r}(t_0)$ и импульса $\mathbf{p}(t_0)$ в некоторый момент времени t_0 . Дальнейшее движение частицы в потенциальном поле $U(\mathbf{r})$ происходит согласно уравнениям движения — уравнениям Гамильтона:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad \frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{r}}, \quad (1.2)$$

где

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \quad (1.3)$$

— функция Гамильтона.

В квантовой механике принципиально изменяется понятие состояния частицы уже потому, что у волны нет траектории и задать одновременно координату и импульс невозможно. Описание волновых свойств частицы в некоторый момент времени t_0 дается волновой функцией $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$. Изменение этой функции со временем происходит согласно уравнению Шредингера (см. § 4 и § 7). Связь такого описания с экспериментом

дается следующим постулатом: **квадрат модуля волновой функции пропорционален плотности вероятности**, т. е. вероятность $dW(\mathbf{r})$ найти частицу в объеме dV есть

$$dW(\mathbf{r}) \propto |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV. \quad (1.4)$$

Отсюда видно, что функции $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ и $\Psi_2(\mathbf{r}, t) = e^{i\alpha}\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ задают одну и ту же плотность вероятности.

Плоская волна, соответствующая частице с энергией $E = \hbar\omega$, импульсом $\mathbf{p} = (\hbar k, 0, 0)$ и массой m , имеет вид

$$\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)}.$$

В этой волне поверхность постоянной фазы перемещается с фазовой скоростью

$$u = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p}, \quad (1.5)$$

а закон дисперсии соответствует нелинейной зависимости частоты от волнового вектора

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad (1.6)$$

Рассмотрим волновой пакет, близкий к монохроматической волне с волновым вектором k_0 и частотой $\omega_0 = \omega(k_0)$:

$$\Psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k_0) e^{i(kx - \omega t)} dk, \quad (1.7)$$

и разложим частоту $\omega(k)$ по малому отклонению $k - k_0 \equiv q$ до линейных членов:

$$\omega(k) = \omega_0 + vq + \dots, \quad v = \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{k_0}.$$

В результате интегрирования получим:

$$\Psi(x, t) = B e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} f(x, t), \quad B = A(k_0) 2\Delta k, \quad (1.8)$$

$$f(x, t) = \frac{1}{2\Delta k} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i(qx - qvt)} dq = \frac{\sin[(x - vt)\Delta k]}{(x - vt)\Delta k}. \quad (1.9)$$

Зависимость функции $f^2(x, t)$ от x изображена на рис. 2. Из формулы (8) и рис. 2 видно, что максимум выражения

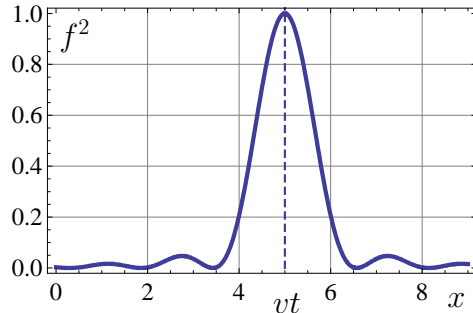


Рис. 2. Зависимость функции $f^2(x, t)$ из (1.9) от x (в качестве единицы длины выбрана величина $1/\Delta k$)

$|\Psi(x, t)|^2 = |Bf(x, t)|^2$ находится в точке

$$x = vt$$

и что в рассматриваемом приближении пакет движется, не изменяя своей формы, с групповой скоростью

$$v = \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{k_0} = \left. \frac{\partial E}{\partial p} \right|_{p_0} = \frac{\hbar k_0}{m}. \quad (1.10)$$

В следующем приближении квантовомеханические волновые пакеты, соответствующие свободным частицам, расплываются из-за того, что фазовая скорость

$$u = \frac{\omega(k)}{k} = \frac{\hbar k}{2m} \quad (1.11)$$

различна для разных значений волнового вектора.

§ 2. Соотношение неопределённостей. Оценки

В монохроматической плоской волне импульс частицы имеет определённое значение, а её координата полностью не определена, поэтому дисперсия импульса $\Delta p = 0$, а дисперсия координаты $\Delta x = \infty$. Аналогично в этой волне $\Delta E = 0$, $\Delta t = \infty$. Конечные значения Δx и Δt можно получить, используя волновые пакеты, например, вида (1.8). Из формулы (1.8) и рис. 2 видно, что в этом пакете при фиксированном времени t амплитуда $f(x, t)$ заметно отлична от нуля в области размером

$$\Delta x \gtrsim \frac{1}{\Delta k},$$

т. е.

$$\Delta p \cdot \Delta x \gtrsim \hbar.$$

Разброс частот определяется соотношением

$$\Delta \omega = \frac{\partial \omega}{\partial k} \Delta k = v \Delta k.$$

При фиксированном x из (1.9) следует, что $f(x, t)$ заметно отлична от нуля в интервале времен

$$\Delta t \gtrsim v \Delta k \sim \frac{1}{\Delta \omega},$$

т. е.

$$\Delta E \cdot \Delta t \gtrsim \hbar.$$

Оценим, используя соотношение $\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar$, энергию основного состояния гармонического осциллятора:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

Поскольку у осциллятора средние значения координаты и импульса равны нулю ($\langle x \rangle = 0$, $\langle p \rangle = 0$), то из $\langle x^2 \rangle = (\Delta x)^2$ и

$\langle p^2 \rangle = (\Delta p)^2$ получаем:

$$E = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\Delta x)^2}{2} \gtrsim \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2.$$

Минимум функции $E(\Delta x)$ соответствует

$$\Delta x \sim \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}},$$

что дает

$$E_{\min} \sim \hbar\omega$$

(точное значение $E_{\min} = \frac{1}{2}\hbar\omega$, см. § 7).

Задачи

2.1. Покажите, что при лобовом соударении лазерного фотона (энергия $\hbar\omega$) с ультрарелятивистским электроном (энергия $E \gg m_e c^2$) энергия рассеянного назад фотона равна

$$\hbar\omega' = \frac{x}{x+1}E, \quad x = \frac{4\hbar\omega E}{m_e^2 c^4}.$$

Найти $\hbar\omega'$ для:

а) $\hbar\omega = 1, 2$ эВ (инфракрасный лазер на неодимовом стекле) и $E = 46$ ГэВ (ускоритель SLAC (Стэнфорд), опыты по нелинейному эффекту Комптона, 1996 г.);

б) $\hbar\omega = 1, 2$ эВ и $E = 5$ ГэВ (ускоритель ВЭПП-4М (Новосибирск), опыты по расщеплению фотона на два фотона в поле ядра, 1997 г.).

2.2. Полагая, что для дифракции на кристаллической решетке полезно иметь частицы с длиной волны $\lambda \sim 10^{-8}$ см, найти энергию фотона, электрона и нейтрона с этой длиной волны.

2.3. Оценить энергию электрона, необходимую для изучения строения атома (размер $a \sim 10^{-8}$ см), атомного ядра (размер $R \sim 10^{-12}$ см), протона (размер $R_p \sim 10^{-13}$ см).

2.4. Ультрахолодными называются нейтроны, скорость которых $v \lesssim 1$ м/с. Найти их длину волны и температуру.

2.5. Найти $|\Psi(x, t)|^2$, если

$$A(k) = A_0 e^{-(k-k_0)^2/(2\Delta k)^2},$$

для частиц с законом дисперсии $\omega = ck$ (электромагнитные волны в пустоте) и

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

(нерелятивистская свободная частица массы m).

2.6. Используя соотношение неопределённостей, оценить энергию основного состояния частицы в поле $U(x) = \alpha|x|$.

2.7. Используя соотношение неопределённостей, оценить глубину уровня в одномерной прямоугольной мелкой яме.

2.8. Оценить минимальную энергию для частицы в поле

$$U(x) = -V \frac{a^2}{x^2 + a^2}$$

при условии $Vma^2/\hbar^2 \ll 1$.

2.9. Покажите, используя соотношение неопределённостей, что энергия основного состояния атома водорода

$$E_{\min} \sim -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -13,6 \text{ эВ}.$$

§ 3. Координатное и импульсное представления. Операторы физических величин

Мы уже знаем, что в данном квантовом состоянии $\Psi(x, t)$ плотность вероятности найти частицу в точке x , т. е. величину dW/dx , пропорциональна $|\Psi(x, t)|^2$ — квадрату модуля волновой функции. Если же волновая функция $\Psi(x, t)$ нормирована

условием¹

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1,$$

то

$$\frac{dW(x, t)}{dx} = |\Psi(x, t)|^2.$$

Отсюда среднее значение x равно

$$\langle x \rangle = \int x dW = \int x |\psi(x)|^2 dx = \int \psi^*(x) x \psi(x) dx.$$

Аналогично среднее значение любой функции $F(x)$ равно

$$\langle F(x) \rangle = \int \psi^*(x) F(x) \psi(x) dx.$$

Если

$$\psi(x) = \int A(k) e^{ikx} dk,$$

то вероятность найти частицу с импульсом $p = \hbar k$ пропорциональна $|A(k)|^2$, или

$$\frac{dW(k)}{dk} \propto |A(k)|^2.$$

Условию нормировки в x -пространстве

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

соответствует условие нормировки в k -пространстве

$$\int |\varphi(k)|^2 dk = 1,$$

где

$$\varphi(k) = \frac{A(k)}{\sqrt{2\pi}}$$

— нормированный Фурье-образ функции $\psi(x)$, т. е.

$$\psi(x) = \int \varphi(k) \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} dk, \quad \varphi(k) = \int \psi(x) \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}} dx. \quad (3.1)$$

Поэтому плотность вероятности в k -пространстве есть

$$\frac{dW(k)}{dk} = |\varphi(k)|^2$$

и среднее значение функции $F(k)$ равно

$$\langle F(k) \rangle = \int F(k) dW(k) = \int \varphi^*(k) F(k) \varphi(k) dk.$$

Выразим $\langle p \rangle$ через $\psi(x)$. Подставляя в соотношение

$$\langle p \rangle = \int \varphi^*(k) \hbar k \varphi(k) dk$$

выражение $\varphi(k)$ через $\psi(x)$ из (3.1), получим

$$\langle p \rangle = \int \left[\int \psi^*(x') \frac{e^{ikx'}}{\sqrt{2\pi}} dx' \right] \hbar k \left[\int \psi(x) \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}} dx \right] dk.$$

Используя тождество

$$k e^{-ikx} = i \frac{d}{dx} e^{-ikx}$$

и интегрируя по частям по переменной x , получим окончательно

$$\langle p \rangle = \int \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \psi(x) dx.$$

Здесь при интегрировании по k использована формула

$$\int e^{ik(x'-x)} dk = 2\pi \delta(x' - x).$$

Таким образом, при нахождении $\langle p \rangle$ можно пользоваться формулой

$$\langle p \rangle = \int \psi^*(x) \hat{p} \psi(x) dx,$$

¹В дальнейшем мы будем опускать обозначения пределов интегрирования, если интегрирование ведется по всей оси.

где оператор

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}. \quad (3.2)$$

В квантовой механике **постулируется, что наблюдаемые динамические величины описываются операторами**, так что среднее значение некоторой величины A в состоянии с заданной волновой функцией $\psi(x)$ (или $\varphi(p)$) равно

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx = \int \varphi^*(p) \hat{A} \varphi(p) dp.$$

В частности, оператор импульса в x -пространстве определяется формулой (3.2), а в p -пространстве — это просто оператор умножения $\hat{p} = p$. Аналогично оператор $\hat{x} = x$ в x -пространстве и

$$\hat{x} = +i\hbar \frac{d}{dp}$$

в p -пространстве.

Из операторов $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{p}}$ строятся все динамические переменные. Например, оператор момента импульса:

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

Несколько более подробно формализм квантовой механики изложен в Приложении.

Задачи

3.1. Для потенциального ящика вида

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0 \\ 0 & \text{при } 0 < x < a \\ \infty & \text{при } x > a \end{cases}$$

найти уровни энергии E_n и волновые функции $\psi_n(x)$, предполагая, что состояние частицы внутри ящика описывается стоячей

волной вида $\psi(x) = A \sin(kx)$ с узлами на границах ящика. Оценить E_n для:

- частицы массы $m \sim 1$ г в ящике размером $a \sim 1$ см;
- молекулы H_2 в ящике размером $a \sim 1$ см; найти n , соответствующий энергии $E_n \sim kT$, где $T \sim 300$ К; оценить $(E_n - E_{n-1})/E_n$ для данной энергии;
- электрона в ящике размером $a \sim 10^{-8}$ см.

Сравнить классическую плотность вероятности, определённую соотношением

$$\frac{dW(x)_{\text{класс}}}{dx} = \frac{2}{v(x)T_{\text{класс}}},$$

где $T_{\text{класс}}$ — классический период колебаний, а

$$v(x) = \sqrt{\frac{2}{m} [E - U(x)]}$$

— классическая скорость частицы в точке x , и квантовую плотность вероятности $dW/dx = |\psi_n(x)|^2$ при $n = 1$ и $n \gg 1$. Провести такое же сравнение для dW/dp — плотности вероятности в импульсном пространстве.

3.2. Найти изменение с течением времени волновой функции нерелятивистской свободной частицы массы m , если в начальный момент времени

$$\Psi(\mathbf{r}, 0) = A e^{-(r^2/a^2) + i\mathbf{b}\mathbf{r}}.$$

3.3. Найти $\varphi(\mathbf{k})$ для волновой функции

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}}, \quad a = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ см}$$

(основное состояние атома водорода). Пусть данная волновая функция описывает состояние свободного электрона при $t = 0$. Оценить, на каком расстоянии окажется электрон через 1 с.

Глава II

УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА. ОПЕРАТОРЫ

§ 4. Оператор Гамильтона. Уравнение Шрёдингера

В классической механике уравнения движения частицы в потенциальном поле $U(\mathbf{r})$ имеют вид (1.2) с функцией Гамильтона (1.3). В квантовой механике классическая функция Гамильтона

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r})$$

заменяется оператором Гамильтона

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r}),$$

который и должен определять эволюцию состояния частицы, т. е. закон изменения со временем волновой функции частицы $\Psi(\mathbf{r}, t)$.

Для плоской волны

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\mathbf{p}\mathbf{r} - Et)/\hbar},$$

соответствующей свободному движению частицы с энергией E , легко проверить, что изменение волновой функции со временем происходит согласно уравнению

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{E}{i\hbar} \Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad \hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}.$$

Можно ожидать, что и в общем случае эволюция волновой функции будет происходить по тому же закону. Конечно, все это лишь наводящие соображения, показывающие естественность следующего утверждения: в квантовой механике **постулируется уравнение Шрёдингера в виде**

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}). \quad (4.1)$$

Его также называют *нестационарным уравнением Шрёдингера* (E. Schrödinger, 1926). Более подробное рассмотрение этого уравнения будет дано в § 8.

Если в этом уравнении можно разделить временные и пространственные переменные, записав

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_E(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar},$$

то для функции $\psi_E(\mathbf{r})$ мы получаем *стационарное уравнение Шрёдингера*:

$$\hat{H} \psi_E(\mathbf{r}) = E \psi_E(\mathbf{r}). \quad (4.2)$$

С математической точки зрения это уравнение — задача на собственные значения оператора \hat{H} . Если потенциальная энергия $U(\mathbf{r})$ — непрерывная функция, то решения этого уравнения ищутся в классе функций, непрерывных вместе с первыми и вторыми производными. Если же потенциальная энергия имеет разрывы, то первые производные волновой функции также могут иметь разрывы (см. ниже), но сама волновая функция и плотность вероятности $dW/dV \propto |\psi_E(\mathbf{r})|^2$ являются непрерывными функциями.

Рассмотрим типичный пример, когда потенциальная энергия обращается в нуль на бесконечности, $U(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, а на конечных расстояниях принимает как положительные, так и отрицательные значения. В этом случае при больших значениях r движение частицы с энергией $E > 0$ почти свободно,

и, следовательно, спектр значений E — непрерывен. Напротив, при отрицательных энергиях $E < 0$ мы имеем дело со связанными состояниями, частица не уходит на бесконечность, спектр значений E дискретный. В случае связанных состояний волновые функции нормируемы, т. е. для них

$$\int |\psi_{E_n}(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1,$$

и потому для достаточно гладких функций

$$\psi_{E_n}(\mathbf{r}) \rightarrow 0 \quad \text{при } r \rightarrow \infty.$$

§ 5. Стационарное уравнение Шрёдингера. Одномерный случай

5.1. Поведение производной $d\psi(x)/dx$

Рассмотрим более детально случай одномерного движения. Поведение производной $\psi'(x) = d\psi(x)/dx$ определяется видом потенциала. Интегрируя уравнение Шрёдингера в малой окрестности точки $x = a$, получаем:

$$\begin{aligned} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} \psi''(x) dx &= \psi'(a+\varepsilon) - \psi'(a-\varepsilon) = \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} [U(x) - E] \psi(x) dx = \frac{2m}{\hbar^2} \psi(a) \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} U(x) dx, \end{aligned}$$

т. е. $\psi'(x)$ непрерывна в точке $x = a$, если потенциальная энергия $U(x)$ непрерывна или имеет разрыв 1-го рода (конечный скачок) в этой точке. У потенциалов, имеющих скачки 2-го рода (с уходом на бесконечность), $\psi'(x)$ может иметь разрывы (см. пример потенциального ящика). Для потенциальной δ -ямы

$$U(x) = -G \delta(x - a)$$

имеем

$$\psi'(a+\varepsilon) - \psi'(a-\varepsilon) = -\frac{2mG}{\hbar^2} \psi(a). \quad (5.1)$$

5.2. Дискретный спектр

Дискретные уровни в одномерной задаче всегда невырождены, т. е. каждому собственному значению энергии соответствует единственная линейно независимая собственная функция. Допустим обратное: пусть $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ — две линейно независимые собственные функции \hat{H} , отвечающие одному значению E . Тогда

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{2m}{\hbar^2}(U - E) = \frac{\psi_2''}{\psi_2},$$

или

$$\psi_1''\psi_2 - \psi_1\psi_2'' = 0 = \frac{d}{dx}(\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2').$$

Отсюда следует, что $\psi_1'\psi_2 - \psi_1\psi_2' = \text{const}$. Далее, $\text{const} = 0$ из-за поведения $\psi_n(x)$ на бесконечности. В итоге, $\psi_1 = C\psi_2$, т. е. эти функции линейно зависимы.

В одномерной задаче дискретные уровни **чётного гамильтониана**, обладающего свойством

$$\hat{H}(-x) = +\hat{H}(x),$$

имеют определённую чётность, т. е. либо

$$\psi_n(-x) = +\psi_n(x),$$

либо

$$\psi_n(-x) = -\psi_n(x).$$

Действительно, для такого гамильтониана функции $\psi_n(x)$ и $\psi_n(-x)$ являются решениями, отвечающими одному и тому же

значению энергии E_n , а так как в одномерной задаче этот уровень невырожден, то

$$\psi_n(x) = C \psi_n(-x).$$

Сделаем еще одно отражение координат, получим

$$\psi_n(-x) = C \psi_n(x) = C^2 \psi_n(-x),$$

откуда следует, что

$$C = \pm 1.$$

5.3. Прямоугольная потенциальная яма

Рассмотрим прямоугольную потенциальную яму с глубиной V и шириной $2a$, т. е.

$$U(x) = \begin{cases} -V & \text{при } |x| < a \\ 0 & \text{при } |x| > a. \end{cases}$$

Связанным состояниям отвечает энергия $E < 0$, при этом уравнение Шрёдингера имеет вид

$$\begin{aligned} \psi'' + k^2 \psi &= 0 & \text{при } |x| < a, & \quad \hbar k = \sqrt{2m(V - |E|)} \\ \psi'' - \kappa^2 \psi &= 0 & \text{при } |x| > a, & \quad \hbar \kappa = \sqrt{2m|E|}. \end{aligned}$$

Ищем решения такие, чтобы $\psi(x)$ и $\psi'(x)$ были непрерывны, чтобы $\psi(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$ и чтобы $\psi(x)$ была либо чётной, либо нечётной функцией, так как $\hat{H}(-x) = \hat{H}(x)$.

Чётные решения имеют вид

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos kx & \text{при } |x| < a \\ B e^{-\kappa|x|} & \text{при } |x| > a. \end{cases}$$

Из непрерывности $\psi'(x)/\psi(x)$ в точке $x = a$ получаем уравнение

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\kappa}{k} = \sqrt{\frac{2mV}{\hbar^2 k^2} - 1},$$

дающее дискретный ряд значений k_n или E_n (энергия квантуется).

Нечётные решения имеют вид

$$\psi(x) = \begin{cases} C \sin kx & \text{при } |x| < a \\ \pm D e^{-\kappa|x|} & \text{при } x \gtrless \pm a \end{cases},$$

а уровни энергии определяются из уравнения

$$-\operatorname{ctg} ka = \frac{\kappa}{k} = \sqrt{\frac{2mV}{\hbar^2 k^2} - 1}.$$

Легко показать, что чётные и нечётные уровни чередуются и что самый нижний (основной) уровень является чётным. При этом хотя бы одно чётное решение имеется при произвольном значении V , напротив, первое нечётное решение возникает лишь при $ka > \pi/2$, т. е. при

$$V > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

Интересно проследить, как меняется характер решения в зависимости от соотношения между глубиной ямы V и *характерной энергией*

$$E_{\text{хар}} = \frac{\hbar^2}{ma^2}.$$

Мы будем называть яму *глубокой* или *мелкой* в зависимости от того, является ли параметр

$$\xi = \frac{V}{E_{\text{хар}}} = \frac{Vma^2}{\hbar^2}$$

большим, $\xi \gg 1$, или малым, $\xi \ll 1$. Обратим внимание на то, что параметр ξ зависит от произведения Va^2 , так что глубокая (или мелкая) яма одновременно может рассматриваться также как *широкая* (или *узкая*) яма.

В глубокой яме, $V \gg E_{\text{хар}}$, уравнение для определения энергии низких чётных состояний $\text{tg } ka \approx \infty$ соответствует условиям квантования

$$ka = \frac{\pi}{2}(n+1), \quad n = 0, 2, 4, \dots,$$

а уравнение для определения энергии низких нечётных состояний $\text{ctg } ka \approx -\infty$ соответствует условиям квантования

$$ka = \frac{\pi}{2}(n+1), \quad n = 1, 3, 5, \dots$$

Таким образом, в глубокой яме низкие уровни энергии

$$E_n = -V + \frac{(\hbar k_n)^2}{2m} = -V + \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}(n+1)^2, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

совпадают с уровнями энергии потенциального ящика шириной $2a$ (ср. задачу 3.1).

Покажите, что в мелкой яме, $V \ll E_{\text{хар}}$, существует лишь одно связанное состояние с энергией

$$E_0 = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} = -2 \frac{V^2}{E_{\text{хар}}}, \quad \kappa_0 = \frac{2aVm}{\hbar^2}$$

и чётной волновой функцией

$$\psi_0(x) \approx \sqrt{\kappa_0} e^{-\kappa_0|x|}.$$

Обратим внимание на сугубо неклассический характер этого связанного состояния. Действительно, вероятность найти частицу внутри ямы мала:

$$W(|x| < a) = \int_{-a}^a |\psi_0(x)|^2 dx \approx 2\kappa_0 a \ll 1,$$

а характерный размер области, занимаемой волновой функцией, велик по сравнению с шириной ямы:

$$\Delta x \sim \frac{1}{\kappa_0} \gg a.$$

Покажите, используя условие (5.1), что потенциальной энергии

$$U(x) = -G\delta(x)$$

соответствует мелкая яма с

$$\kappa_0 = \frac{mG}{\hbar^2}.$$

5.4. Осцилляционная теорема

Для частицы в прямоугольной потенциальной яме легко усмотреть следующее характерное свойство волновой функции, отвечающей энергии E_n : эта функция имеет ровно n нулей при конечных значениях координаты x . Оказывается, и в общем случае имеет место аналогичное свойство, именно, можно доказать очень полезную в приложениях *осцилляционную теорему* (см., например, книгу Мессиа А. Квантовая механика. М.: Наука, 1978; гл. III § 12).

Волновая функция связанного состояния $\psi_n(x)$, соответствующая $(n+1)$ -у по величине собственному значению энергии E_n , обращается в нуль (при конечных x) n раз.

Задачи

5.1. Найти уровни энергии E_n и волновые функции $\psi_n(x)$ для частицы в поле

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0 \\ -V & \text{при } 0 < x < a \\ 0 & \text{при } x > a. \end{cases}$$

5.2. Найти $\varphi(p)$ и $\langle p^2 \rangle$ для основного состояния частицы в поле

$$U(x) = -G\delta(x).$$

5.3. Найти уровни энергии и волновые функции связанных состояний частицы в поле двух δ -ям

$$U(x) = -G\delta(x+a) - G\delta(x-a)$$

при условии $a \gg \hbar^2/(mG)$. Исследовать зависимость уровней энергии от расстояния a между ямами.

5.4. При каких значениях G_0 в поле

$$U(x) = -G\delta(x-a) + G_0\delta(x) - G\delta(x+a)$$

исчезают связанные состояния? Используя полученный ответ, уточнить, при каких значениях параметра $\xi = mGa/\hbar^2$ имеет смысл подобная постановка задачи.

§ 6. Эрмитовы операторы

Назовем оператор \hat{B} **эрмитово сопряженным** к оператору \hat{A} , если для любых двух функций ψ_1 и ψ_2 выполняется равенство

$$\int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 dx = \int (\hat{B} \psi_1)^* \psi_2 dx .$$

Такой оператор обозначим $\hat{B} = \hat{A}^+$. Если $\hat{A} = \hat{A}^+$, т. е. оператор совпадает со своим эрмитово сопряженным (вместе с областью определения), назовем его **эрмитовым** (или **самосопряженным**). Для эрмитова оператора

$$\int \psi_1^* \hat{A} \psi_2 dx = \int (\hat{A} \psi_1)^* \psi_2 dx .$$

Собственные значения эрмитова оператора вещественны. Действительно, если ψ_λ — собственная функция оператора \hat{A} с собственным значением λ , т. е. если

$$\hat{A} \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda,$$

то из соотношения

$$\int \psi_\lambda^* \hat{A} \psi_\lambda dx = \int (\hat{A} \psi_\lambda)^* \psi_\lambda dx$$

следует, что $\lambda = \lambda^*$.

Аналогично показывается, что среднее значение эрмитова оператора $\int \psi^* \hat{A} \psi dx$ в каком-либо квантовом состоянии ψ — вещественное число.

Все операторы физических величин эрмитовы.

Покажем, что собственные функции, отвечающие различным собственным значениям эрмитова оператора, взаимно ортогональны. Для этого домножим равенство $\hat{A} \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda$ слева на ψ_μ^* , а равенство $(\hat{A} \psi_\mu)^* = \mu \psi_\mu^*$ справа на ψ_λ . Проинтегрировав полученные соотношения, найдем

$$\lambda \int \psi_\mu^* \psi_\lambda dx = \mu \int \psi_\mu^* \psi_\lambda dx ,$$

т. е.

$$\int \psi_\mu^* \psi_\lambda dx = 0 \quad \text{при} \quad \mu \neq \lambda .$$

В случае вырождения (когда несколько собственных функций отвечают одному собственному значению) можно выбрать собственные функции ортогональными и соответственно использовать ортонормированную систему функций

$$\int \psi_m^*(x) \psi_n(x) dx = \delta_{mn}$$

для дискретного спектра и

$$\int \psi_\lambda^*(x) \psi_{\lambda'}(x) dx = \delta(\lambda - \lambda')$$

для непрерывного спектра.

Полнота системы собственных функций эрмитового оператора означает, что любую функцию $f(x)$ из рассматриваемого

класса можно представить в виде:

$$f(x) = \sum_n a_n \psi_n(x); \quad a_n = \int \psi_n^*(x') f(x') dx'.$$

Если в первое равенство подставить выражение для a_n , то получим соотношение

$$f(x) = \int f(x') \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') dx'.$$

Поэтому из полноты собственных функций следует, что

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

В частности, для собственных функций оператора \hat{p} имеем

$$\int \psi_p(x) \psi_p^*(x') dp = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{ip(x-x')/\hbar} dp = \delta(x - x').$$

Дираковские обозначения

Дирак предложил удобные обозначения для матричного элемента оператора \hat{A} :

$$A_{fi} = \int \psi_f^*(x) \hat{A} \psi_i(x) dx = \langle f | \hat{A} | i \rangle.$$

В этих обозначениях эрмитовость оператора имеет вид

$$\langle f | \hat{A} | i \rangle = \left(\langle i | \hat{A} | f \rangle \right)^*,$$

ортонормируемость волновых функций означает

$$\langle f | i \rangle = \delta_{fi},$$

а их полнота —

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = 1.$$

Задачи

6.1. Найти операторы, сопряженные к операторам

$$\hat{A} = \frac{d}{dx}, \quad \hat{B} = i \frac{d}{dx}, \quad \hat{C} = m\omega x + \hbar \frac{d}{dx}.$$

6.2. Для оператора \hat{C} , определённого в предыдущей задаче, найти собственные функции и собственные значения. Проверить, что собственные значения этого оператора могут быть комплексными, а собственные функции, отвечающие различным собственным значениям, не обязательно ортогональны.

6.3. Пусть \hat{A} — эрмитов оператор, $\hat{A} = \hat{A}^+$. Покажите, что среднее значение квадрата этого оператора неотрицательно: $\langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle \geq 0$.

6.4. Найти собственные функции оператора \hat{x} в x - и p -представлениях. То же для оператора \hat{p} .

6.5. Найти вид оператора $\hat{A} = 1/r$ в импульсном пространстве.

§ 7. Линейный осциллятор

Рассмотрим задачу о движении частицы массы m в поле $U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Полученные при этом результаты и введенные понятия окажутся полезными при изучении колебаний молекул, ядер, кристаллических решеток, при квантовании электромагнитного поля и т. д.

7.1. Уровни энергии и волновые функции

В этой задаче естественная система единиц включает \hbar , m , ω . Из них строится единица длины

$$\ell = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

энергии $\hbar\omega$ и т. д. (найдите единицы времени, скорости, импульса, силы). Перейдем к безразмерным величинам:

$$x' = \frac{x}{\ell}, \quad E' = \frac{E}{\hbar\omega};$$

при этом обычная волновая функция $\psi(x)$ связана с безразмерной волновой функцией $\tilde{\psi}(x')$ соотношением

$$\psi(x) = \frac{\tilde{\psi}(x/\ell)}{\sqrt{\ell}}.$$

Тогда мы получим уравнение Шрёдингера в виде

$$\frac{d^2\tilde{\psi}(x')}{dx'^2} + (2E' - x'^2)\tilde{\psi}(x') = 0;$$

в дальнейшем знаки тильды и штриха опускаем.

При $x \rightarrow \pm\infty$ имеем $d^2\psi/dx^2 = x^2\psi$, т. е. $\psi \rightarrow e^{\pm x^2/2}$. Поэтому ищем нормируемые, убывающие на бесконечности решения в виде

$$\psi(x) = e^{-x^2/2} v(x),$$

где функция $v(x)$ удовлетворяет уравнению

$$v''(x) - 2xv'(x) + (2E - 1)v(x) = 0.$$

Ищем $v(x)$ в виде ряда

$$v(x) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s x^s.$$

Возникающее таким образом уравнение

$$\sum_s x^s [(2E - 1 - 2s)a_s + (s+1)(s+2)a_{s+2}] = 0$$

приводит к рекуррентному соотношению для коэффициентов

$$a_{s+2} = \frac{2s+1-2E}{(s+1)(s+2)} a_s.$$

Оно означает в частности, что функция $v(x)$ содержит слагаемые одинаковой чётности. Условие

$$\lim_{s \rightarrow \infty} \frac{a_{s+2}}{a_s} = \frac{2}{s} \rightarrow 0$$

обеспечивает сходимость ряда при всех x , но при $x \rightarrow \pm\infty$ функция $v(x)$ асимптотически совпадает с функцией

$$\sum_k \frac{(x)^{2k}}{k!} = e^{x^2}.$$

Чтобы получить $\psi(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \pm\infty$, необходимо ряд для $v(x)$ оборвать при некотором $s = n$, положив

$$2E = 2n + 1.$$

В итоге получаем уровни энергии и нормированные волновые функции:

$$E_n = n + \frac{1}{2}, \quad \psi_n(x) = \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{4\pi}} \frac{H_n(x)}{\sqrt{n! 2^n}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Здесь $H_n(x)$ – полиномы Эрмита:

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x).$$

Полином Эрмита $H_n(x)$ имеет, в согласии с осцилляционной теоремой, n нулей, все они расположены в классически доступной области $|x| < a_n$, где

$$a_n = \sqrt{2E_n} = \sqrt{n + 1/2}$$

– амплитуда колебаний осциллятора с энергией E_n . Отметим, что состояние $\psi_n(x)$ имеет определённую чётность:

$$\psi_n(-x) = (-1)^n \psi_n(x).$$

Интересно сравнить классическое и квантовое описание линейного осциллятора. Для основного состояния квантовая

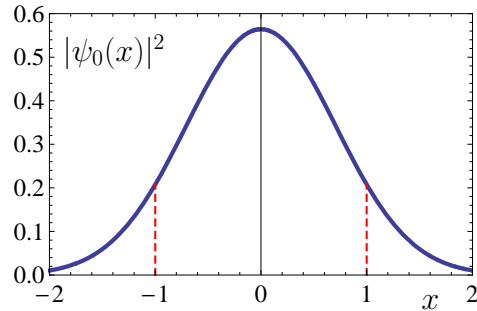


Рис. 3. Квантовая плотность вероятности для основного состояния осциллятора (пунктирные линии отмечают классически доступную область движения)

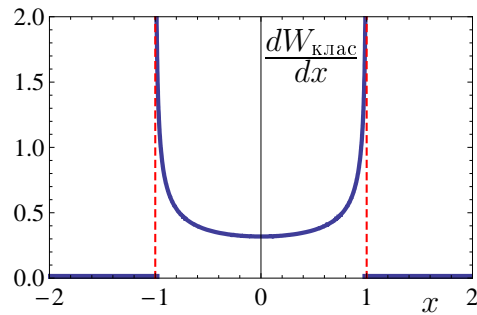


Рис. 4. Классическая плотность вероятности для основного состояния осциллятора $E_0 = 1/2$

плотность вероятности — величина $|\psi_0(x)|^2$ — изображена на рис. 3. Классическая плотность вероятности определяется функцией (ср. задачу 3.1)

$$\frac{dW(x)_{\text{клас}}}{dx} = \frac{2}{v(x)T_{\text{клас}}} = \begin{cases} \frac{1}{\pi\sqrt{a_n^2 - x^2}} & \text{при } |x| < a_n \\ 0 & \text{при } |x| > a_n, \end{cases}$$

для $E_0 = 1/2$ эта функция изображена на рис. 4. Видно резкое различие классической и квантовой картины для основного состояния. Для высоковозбуждённого состояния $n = 30$ квантовая плотность вероятности показана на рис. 5, на этом

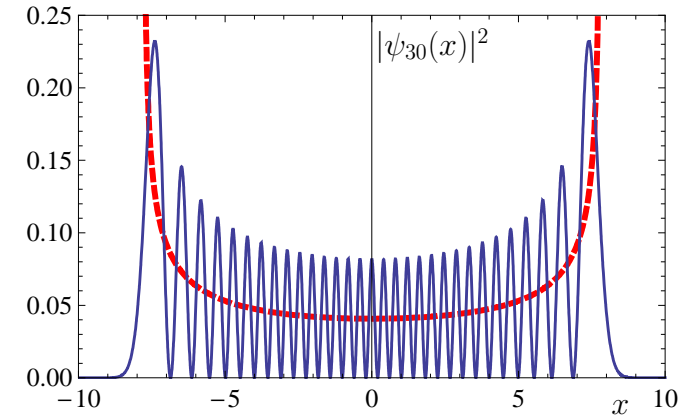


Рис. 5. Квантовая плотность вероятности для $n = 30$ (пунктирной линией изображена классическая плотность вероятности для той же энергии осциллятора)

же рисунке пунктирной линией показана классическая плотность вероятности для той же энергии осциллятора. Видно, что усреднённое значение функции $|\psi_{30}(x)|^2$ практически совпадает с классическим распределением в классически доступной области.

7.2. Операторы рождения и уничтожения кванта

Введем операторы

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + i\hat{p}), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - i\hat{p}), \quad (7.1)$$

для которых перестановочные соотношения имеют вид

$$\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = 1. \quad (7.2)$$

Напомним, что в классической механике величины a и ia^* являются каноническими переменными, для которых функция Гамильтониан $H = a^*a$.

В квантовой механике оператор Гамильтона осциллятора через введенные операторы записывается в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+). \quad (7.3)$$

Используя перестановочные соотношения (2), нетрудно показать, что оператор Гамильтона может быть выражен также в виде

$$\hat{H} = \hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2} = \hat{a}\hat{a}^+ - \frac{1}{2} \quad (7.4)$$

и что

$$\hat{H}\hat{a}^+ = \hat{a}^+(\hat{H} + 1), \quad \hat{H}\hat{a} = \hat{a}(\hat{H} - 1). \quad (7.5)$$

Пусть $|n\rangle$ — нормированное состояние осциллятора с энергией $E_n = n + \frac{1}{2}$, т. е.

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle = (n + \frac{1}{2})|n\rangle.$$

Тогда $\hat{a}^+|n\rangle$ и $\hat{a}|n\rangle$ — состояния (ненормированные) с энергией $E_n + 1$ и $E_n - 1$ соответственно. Действительно, из (5) следует, что

$$\hat{H}\hat{a}^+|n\rangle = \hat{a}^+(\hat{H} + 1)|n\rangle = (E_n + 1)\hat{a}^+|n\rangle,$$

а также аналогичное уравнение для $\hat{a}|n\rangle$:

$$\hat{H}\hat{a}|n\rangle = (E_n - 1)\hat{a}|n\rangle.$$

Таким образом, действие оператора \hat{a}^+ на состояние $|n\rangle$ переводит его в состояние $|n+1\rangle$, т. е. повышает энергию состояния на 1 (на $\hbar\omega$ в обычных единицах):

$$\hat{a}^+|n\rangle = c_n|n+1\rangle, \quad (7.6)$$

а действие оператора \hat{a} на состояние $|n\rangle$ переводит его в состояние $|n-1\rangle$, т. е. понижает энергию состояния на 1. Это позволяет использовать удобную интерпретацию: состояние $|n\rangle$ содержит n одинаковых частиц (квантов) с энергией $E = 1$ (или $\hbar\omega$

в обычных единицах) каждая, оператор \hat{a}^+ называют повышающим оператором, или оператором рождения такой частицы, а оператор \hat{a} — понижающим оператором, или оператором уничтожения. Заметим еще, что собственные значения оператора

$$\hat{n} = \hat{a}^+\hat{a} = \hat{H} - \frac{1}{2}$$

равны n , поэтому \hat{n} называют **оператором числа частиц**.

Найдем коэффициент c_n . Для этого вычислим норму вектора (6):

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle = \langle n|\hat{H} + \frac{1}{2}|n\rangle = n + 1 = c_n^2.$$

Отсюда $c_n = \sqrt{n+1}$. Таким образом, состояние $|n\rangle$ может быть записано так:

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle,$$

а отличным от нуля матричные элементы операторов рождения и уничтожения равны

$$\langle n+1|\hat{a}^+|n\rangle = \langle n|\hat{a}|n+1\rangle = \sqrt{n+1}. \quad (7.7)$$

Отсюда можно найти и матричные элементы координаты:

$$\langle n+1|x|n\rangle = \langle n|x|n+1\rangle = \sqrt{\frac{n+1}{2}}. \quad (7.8)$$

Волновая функция основного состояния может быть найдена из условия

$$\hat{a}\psi_0(x) = 0,$$

что дает

$$\psi_0(x) = \frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt[4]{\pi}}.$$

В итоге получаем компактное выражение для волновой функции с произвольным n :

$$\psi_n(x) = \frac{(\hat{a}^+)^n e^{-x^2/2}}{\sqrt{n!} \sqrt[4]{\pi}}.$$

Задачи

7.1. Найти вероятность того, что в основном состоянии осциллятор находится в классически недоступной области $|x| > \ell$.

7.2. Найти $\varphi_n(p)$ для линейного осциллятора. Сравнить классическую $dW_{\text{класс}}/dp$ и квантовую $|\varphi_0(p)|^2$ плотности вероятности в импульсном пространстве при $n = 0$.

7.3. Найти матричные элементы p_{fi} , $(x^2)_{fi}$, $(p^2)_{fi}$ для линейного осциллятора.

7.4. Найти Δx и Δp для линейного осциллятора в n -м состоянии.

7.5. Частица находится в осцилляторном поле $U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ в состоянии, заданном волновой функцией

$$\psi(x) = \frac{C}{x^2 + a^2}, \quad C = \sqrt{\frac{2a^3}{\pi}}.$$

Найти вероятности W_0 и W_1 того, что при измерении энергии частицы будут найдены значения, равные соответственно $\frac{1}{2}\hbar\omega$ и $\frac{3}{2}\hbar\omega$. При вычислении W_0 считать, что $a \ll \sqrt{\hbar/(m\omega)}$.

7.6. Найти среднее значение коммутатора кинетической \hat{K} и потенциальной U энергий для n -го состояния линейного осциллятора, т. е. величину

$$\int \psi_n^*(x) [\hat{K}, U] \psi_n(x) dx, \quad \hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m}, \quad U = \frac{m\omega^2 x^2}{2}.$$

§ 8. Эволюция волновой функции со временем

Рассмотрим подробнее нестационарное уравнение Шрёдингера

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

которое является одним из основных постулатов квантовой механики (см. § 4). Его свойства:

— уравнение Шрёдингера **линейно**, поэтому если $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ и $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$ — решения уравнения Шрёдингера, то их линейная комбинация

$$c_1 \Psi_1(\mathbf{r}, t) + c_2 \Psi_2(\mathbf{r}, t)$$

также является решением уравнения Шрёдингера (**принцип суперпозиции**);

— уравнение Шрёдингера имеет **первый порядок по времени**, поэтому значение $\Psi(\mathbf{r}, t)$ в любой момент времени t полностью определяется, если известна $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$ в некоторый момент времени t_0 (**принцип причинности в квантовой механике**).

Для стационарного решения

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar}$$

плотность вероятности $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ не зависит от t . Общее решение можно представить в виде разложения по стационарным решениям

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\mathbf{r}),$$

где

$$c_n = \int \psi_n^*(\mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', 0) d^3 r'.$$

Таким образом, эволюция $\Psi(\mathbf{r}, t)$ с течением времени описывается уравнением

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \Psi(\mathbf{r}', 0) d^3 r',$$

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') e^{-iE_n t/\hbar}.$$

Функция Грина $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$ удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)}{\partial t} = \hat{H}(\mathbf{r}) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t)$$

с начальным условием

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0) = \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Из формулы для средней энергии в данном состоянии

$$\langle E \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t) d^3r = \sum_n E_n |c_n|^2$$

видно, что c_n есть амплитуда вероятности обнаружить у системы энергию E_n . Набор величин c_n есть волновая функция системы в энергетическом представлении.

§ 9. Плотность тока

Изменение плотности вероятности $\varrho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ со временем определяется уравнением

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi.$$

Подставив $\partial \Psi / \partial t$ из уравнение Шрёдингера, получим уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} [\Psi^* \nabla^2 \Psi - (\nabla^2 \Psi^*) \Psi] = -\nabla \mathbf{j},$$

где плотность тока

$$\mathbf{j} = \frac{1}{2m} [\Psi^* (-i\hbar \nabla \Psi) + (-i\hbar \nabla \Psi)^* \Psi].$$

Введем оператор скорости

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{-i\hbar \nabla}{m},$$

тогда выражение для плотности тока можно переписать в виде

$$\mathbf{j} = \frac{1}{2} (\Psi^* \hat{\mathbf{v}} \Psi + \text{комп. сопр.}). \quad (9.1)$$

Если представить волновую функцию в виде

$$\Psi = \sqrt{\varrho} e^{i\phi},$$

где ϱ и ϕ — вещественные функции координат и времени и $\varrho = |\Psi|^2$, то

$$\mathbf{j} = \varrho \frac{\hbar \nabla \phi}{m},$$

т. е. плотность тока отлична от нуля только тогда, когда волновая функция имеет фазу ϕ с нетривиальной зависимостью от координат.

В частности, для плоской волны

$$\Psi = A e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$$

плотность тока равна

$$\mathbf{j} = |A|^2 \mathbf{v}, \quad \text{где } \mathbf{v} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m}.$$

§ 10. Одномерное рассеяние

Рассмотрим рассеяния частиц потенциальным полем указанного на рис. 6 вида:

$$U(x) \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{при } x \rightarrow -\infty \\ V & \text{при } x \rightarrow +\infty. \end{cases}$$

В этом случае задача рассеяния при $E > V$ формулируется так. Слева имеется падающая и отраженная волны, справа — прошедшая волна, т. е. асимптотики волновой функции таковы:

$$\Psi \rightarrow e^{i\omega t} \begin{cases} e^{ikx} + A e^{-ikx}, & \hbar k = \sqrt{2mE} & \text{при } x \rightarrow -\infty \\ B e^{ik_1 x}, & \hbar k_1 = \sqrt{2m(E-V)} & \text{при } x \rightarrow +\infty. \end{cases}$$

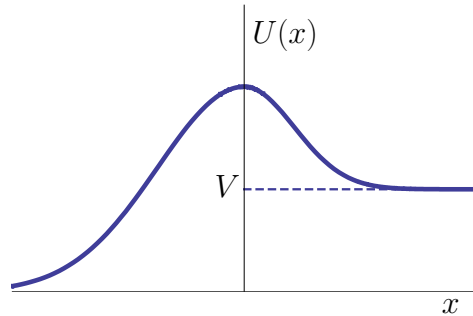


Рис. 6. Потенциальная энергия для случая одномерного рассеяния

Соответствующие x -компоненты плотности тока равны:

$$j_{\text{пад}} = \frac{\hbar k}{m}, \quad j_{\text{отр}} = -|A|^2 \frac{\hbar k}{m}, \quad j_{\text{прош}} = |B|^2 \frac{\hbar k_1}{m}.$$

Определим коэффициенты прохождения D и отражения R соотношениями

$$D = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}}, \quad R = \frac{|j_{\text{отр}}|}{j_{\text{пад}}}, \quad R + D = 1,$$

тогда

$$D = \frac{k_1}{k} |B|^2, \quad R = |A|^2.$$

Оптический аналог этой квантовомеханической задачи — отражение света при нормальном падении на плоскую границу раздела двух сред с разными показателями преломления. В оптике волновой вектор

$$k \equiv \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{\omega}{c} n,$$

где n — показатель преломления. Нашей задаче соответствует ситуация, когда справа — вакуум, а слева — стекло.

В случае $0 < E < V$ асимптотика при $x \rightarrow +\infty$ изменяется:

$$\psi \rightarrow e^{i\omega t} B e^{-\kappa x}, \quad \hbar \kappa = \sqrt{2m(V - E)} \quad \text{при } x \rightarrow +\infty.$$

В этом случае оптический аналог — полное внутреннее отражение света при падении под некоторым углом на границу раздела стекло–вакуум.

Задачи

10.1. Частица находится в поле $U(x) = -G\delta(x)$. При $t = 0$ волновая функция имеет вид

$$\Psi(x, 0) = \frac{e^{-|x|/b}}{\sqrt{b}}.$$

Найти вероятность того, что при $t \rightarrow \infty$ частица окажется в основном состоянии $\psi_0(x)$.

10.2. Тот же вопрос для гармонического осциллятора при

$$\Psi(x, 0) = \frac{e^{-x^2/(2b^2)}}{(\pi b^2)^{1/4}}.$$

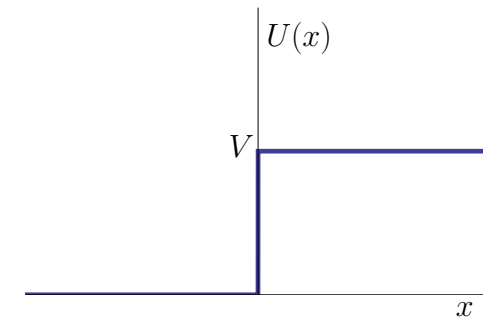


Рис. 7. Потенциальная “ступенька”

10.3. Для поля, описанного в задаче 5.3, определить $\Psi(x, t)$, если при $t < 0$ между ямами была непроницаемая перегородка и частица находилась в стационарном связанном состоянии вблизи левой ямы.

10.4. Найти функцию Грина для свободной частицы.

10.5. Найти коэффициенты D и R для частицы в поле (рис. 7)

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0, \\ V & \text{при } x > 0. \end{cases}$$

Указать оптическую аналогию. Известно, что при отражении от оптически более плотной среды происходит потеря полуволны. Чему соответствует это явление в данной задаче? Рассмотреть предел $\hbar \rightarrow 0$.

10.6. Найти коэффициент прохождения D для частицы в поле прямоугольной потенциальной ямы глубиной V и шириной a (рис. 8). Дать график $D(E)$, указать условие прозрачности.

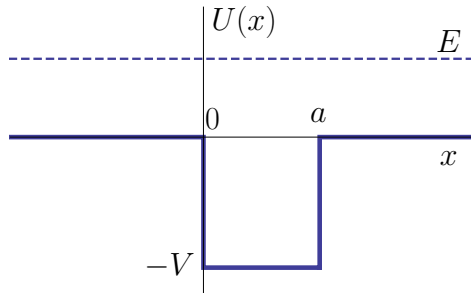


Рис. 8. Прохождение частицы над одномерной прямоугольной потенциальной ямой

Используя оптическую аналогию, указать необходимое условие прозрачности в случае поля (рис. 9)

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0 \\ -V_1 & \text{при } 0 < x < a \\ -V_2 & \text{при } x > a, \end{cases}$$

соответствующего при $V_1 < V_2$ просветленной оптике.

10.7. Найти коэффициент прохождения $D(E)$ для частицы в поле прямоугольного потенциального барьера высотой V и шириной a (рис. 10), особо рассмотреть случай $E < V$, $\hbar a \gg 1$.

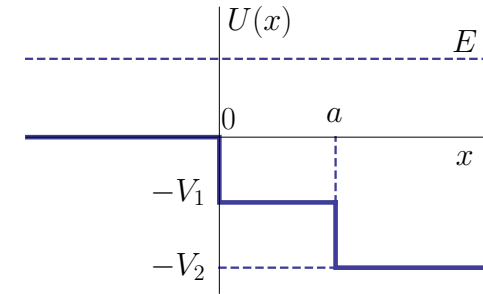


Рис. 9. Потенциальная энергия, соответствующая случаю просветленной оптики

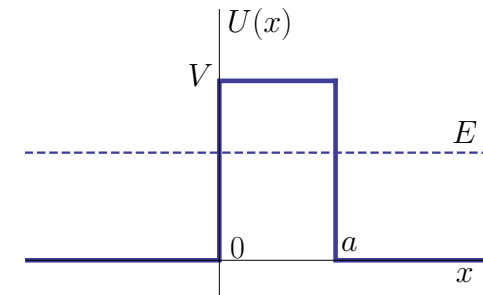


Рис. 10. Туннелирование частицы через одномерный прямоугольный потенциальный барьер

10.8. Рассмотреть рассеяние в поле $U(x) = -G\delta(x)$. Обратите внимание на поведение амплитуд отраженной и прошедшей волн при продолжении решения в область $E < 0$.

§ 11. Коммутаторы

Величина

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$$

называется *коммутатором* двух операторов \hat{A} и \hat{B} . Если коммутатор двух операторов равен нулю, то говорят, что эти операторы *коммутируют*. Если операторы \hat{A} и \hat{B} эрмитовы, а их

коммутатор имеет вид $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$, то \hat{C} — эрмитов оператор, $\hat{C}^+ = \hat{C}$.

11.1. Коммутаторы и измеримость величин

Пусть ψ_a и $\psi_{a'}$ — собственные функции оператора \hat{A} с различными собственными значениями, $a \neq a'$. Ясно, что матричный элемент оператора \hat{A} между двумя этими состояниями равен нулю:

$$\langle \psi_{a'} | \hat{A} | \psi_a \rangle = a \langle \psi_{a'} | \psi_a \rangle = 0.$$

Оказывается, что это же справедливо и для любого оператора \hat{B} , коммутирующего с оператором \hat{A} . Действительно, из соотношения

$$0 = \langle \psi_{a'} | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi_a \rangle = \langle \psi_{a'} | \hat{A} \hat{B} | \psi_a \rangle - \langle \psi_{a'} | \hat{B} \hat{A} | \psi_a \rangle$$

следует

$$0 = (a' - a) \langle \psi_{a'} | \hat{B} | \psi_a \rangle,$$

т. е.

$$\langle \psi_{a'} | \hat{B} | \psi_a \rangle = 0.$$

Приведем простой и полезный в дальнейшем пример. Легко проверить, что оператор $\hat{M}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x$ коммутирует с координатой z . Пусть ψ_m — собственная функция оператора \hat{M}_z . Тогда для матричных элементов координаты z существует правило отбора:

$$\langle \psi_{m'} | z | \psi_m \rangle = 0, \text{ если } m \neq m'.$$

Если величины A и B одновременно измеримы, то соответствующие операторы коммутируют. Действительно, для одновременно измеримых величин A и B существует полная система волновых функций ψ_n , таких, что ψ_n — одновременно собственная функция и \hat{A} , и \hat{B} с собственными значениями a_n и

b_n . Произвольную функцию ψ представим в виде разложения

$$\psi = \sum_n c_n \psi_n$$

и подействуем на нее оператором $\hat{A}\hat{B}$. В итоге получим:

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}\hat{B} \sum_n c_n \psi_n = \sum_n c_n a_n b_n \psi_n = \sum_n c_n \hat{B}\hat{A} \psi_n = \hat{B}\hat{A}\psi,$$

т. е. в этом случае

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

И обратно, если $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, то \hat{A} и \hat{B} имеют общую систему собственных функций. Пусть ψ_a — собственная функция \hat{A} :

$$\hat{A}\psi_a = a\psi_a,$$

тогда

$$\hat{B}\hat{A}\psi_a = a\hat{B}\psi_a = \hat{A}\hat{B}\psi_a,$$

т. е. $\hat{B}\psi_a$ — тоже собственная функция оператора \hat{A} с собственным значением a . Если спектр невырожден, то отсюда следует, что $\hat{B}\psi_a$ с точностью до множителя совпадает с ψ_a , т. е. $\hat{B}\psi_a = b\psi_a$, так что ψ_a , действительно, является собственной функцией оператора \hat{B} с собственным значением b . В случае вырожденного спектра можно выбрать такие линейные комбинации $\sum_i c_i \psi_{ai}$ собственных функций оператора \hat{A} , которые будут одновременно собственными функциями \hat{B} .

Рассмотрите также случай $a = b = 0$.

11.2. Коммутаторы и соотношение неопределённостей

Пусть система находится в квантовом состоянии $|\psi\rangle$. Физические величины A и B в этом состоянии имеют средние значения

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

и дисперсии, определённые соотношениями

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}, \quad \Delta B = \sqrt{\langle (B - \langle B \rangle)^2 \rangle}.$$

Пусть эрмитовы операторы \hat{A} и \hat{B} не коммутируют:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C},$$

где \hat{C} — эрмитов оператор. Введем операторы

$$\hat{a} = \hat{A} - \langle A \rangle, \quad \hat{b} = \hat{B} - \langle B \rangle,$$

для которых

$$\langle \psi | \hat{a}^2 | \psi \rangle = (\Delta A)^2, \quad \langle \psi | \hat{b}^2 | \psi \rangle = (\Delta B)^2, \quad [\hat{a}, \hat{b}] = i\hat{C}.$$

Рассмотрим теперь состояние

$$|\tilde{\psi}\rangle = (\beta\hat{a} + i\hat{b})|\psi\rangle,$$

где коэффициент β веществен. Ясно, что

$$J(\beta) \equiv \langle \tilde{\psi} | \tilde{\psi} \rangle \geq 0,$$

но тогда

$$\begin{aligned} J(\beta) &= \langle \psi | (\beta\hat{a} - i\hat{b})(\beta\hat{a} + i\hat{b}) | \psi \rangle = \langle \psi | \beta^2\hat{a}^2 + i\beta(\hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a}) + \hat{b}^2 | \psi \rangle = \\ &= \beta^2(\Delta A)^2 - \beta\langle C \rangle + (\Delta B)^2 \geq 0. \end{aligned}$$

При $\langle C \rangle \neq 0$ отсюда следует содержательное утверждение: $(\Delta A)^2 \cdot (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4}\langle C \rangle^2$. Таким образом,

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle C \rangle|,$$

т. е. произведение неопределённостей (дисперсий) двух физических величин в данном квантовом состоянии не меньше половины модуля среднего значения коммутатора этих величин в данном состоянии.

Простой пример: так как

$$[x, \hat{p}_x] = i\hbar,$$

то для любого квантового состояния справедливо соотношение

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

§ 12. Производная от оператора по времени. Теорема Эренфеста

В классической механике основные динамические переменные — координаты и импульсы — явно зависят от времени: $\mathbf{r}(t)$, $\mathbf{p}(t)$. Произвольная физическая величина $A = A(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t), t)$ может зависеть от времени ещё и частным образом (как от параметра). Производная по времени от этой величины может быть найдена с помощью скобки Пуассона:

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \{H, A\}. \quad (12.1)$$

В квантовой механике операторы $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$ и $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ не зависят от времени, а оператор некоторой физической величины $\hat{A}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}, t)$ может зависеть от t лишь как от параметра. Зависимость среднего значения этой величины от времени

$$\langle A(t) \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \Psi(\mathbf{r}, t) d^3r \equiv \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle$$

связана в основном с волновой функцией $\Psi(\mathbf{r}, t)$, которая удовлетворяет уравнению Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t).$$

Такая схема квантовой механики называется *представлением Шрёдингера* (более близкая к классической механике схема

квантовой механики, называемая *представлением Гайзенберга*, будет рассмотрена в § 14).

Когда возникает необходимость использовать величину, соответствующую классической производной по времени от величины $A(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t), t)$, приходится *определять* соответствующий квантовый оператор. Естественно определить оператор производной по времени $\frac{d\hat{A}}{dt}$ требованием, чтобы среднее значение этого оператора совпадало с производной по времени от среднего значения оператора \hat{A} :

$$\left\langle \Psi \left| \frac{d\hat{A}}{dt} \right| \Psi \right\rangle \equiv \frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle.$$

Используя уравнение Шрёдингера, правую часть этого равенства можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle &= \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} \left| \hat{A} \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| \hat{A} \right| \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle = \\ &= \left\langle \Psi \left| \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] \right| \Psi \right\rangle. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}]. \quad (12.2)$$

Покажите, что

$$\frac{dx}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}] = \frac{\hat{p}_x}{m}, \quad \frac{d\hat{p}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_x] = -\frac{\partial U}{\partial x}.$$

Отсюда следует **теорема Эрэнфеста**

$$m \frac{d^2 \langle \mathbf{r} \rangle}{dt^2} = -\langle \nabla U(\mathbf{r}) \rangle. \quad (12.3)$$

Если потенциальная энергия мало изменяется на расстояниях порядка размера волнового пакета, так что

$$\langle \nabla U(\mathbf{r}) \rangle \approx \nabla U(\langle \mathbf{r} \rangle),$$

то из уравнения (3) следует, что для средней координаты волнового пакета приближенно выполняется второй закон Ньютона:

$$m \frac{d^2 \langle \mathbf{r} \rangle}{dt^2} \approx -\nabla U(\langle \mathbf{r} \rangle). \quad (12.4)$$

Более подробно о переходе к пределу классической механики см. § 18.

§ 13. Теорема о вириале

Рассмотрим движение частицы в некотором потенциальном поле $U(\mathbf{r})$. Величина $\mathbf{r} \nabla U(\mathbf{r})$ называется *вириалом* данной механической системы. В классической механике существует определённое соотношение между средними за большой промежуток времени значениями кинетической энергии частицы и вириалом, называемое *теоремой о вириале*. Эта теорема справедлива для финитного движения частицы, происходящего в ограниченной части пространства и с ограниченными скоростями. Покажем, что аналогичное соотношение имеет место и в квантовой механике, только в этом случае речь пойдёт о значениях соответствующих операторов, усреднённых по стационарным квантовомеханическим состояниям.

Предварительно приведём полезные соотношения:

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}; \quad [\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] = i\hbar \nabla U; \quad [\hat{H}, \mathbf{r}] = -\frac{i\hbar}{m} \hat{\mathbf{p}}.$$

Пусть далее $|n\rangle$ — стационарное состояние дискретного спектра (финитное движение), тогда

$$\langle n | [\hat{H}, \hat{A}] | n \rangle = \langle n | \hat{H} \hat{A} | n \rangle - \langle n | \hat{A} \hat{H} | n \rangle = (E_n - E_n) \langle n | \hat{A} | n \rangle = 0.$$

В частности,

$$\begin{aligned} 0 &= \langle n | [\hat{H}, \hat{\mathbf{p}} \mathbf{r}] | n \rangle = \langle n | [\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] \mathbf{r} + \hat{\mathbf{p}} [\hat{H}, \mathbf{r}] | n \rangle = \\ &= i\hbar \left\langle n \left| \mathbf{r} \nabla U - \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m} \right| n \right\rangle. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$2 \cdot \left\langle n \left| \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \right| n \right\rangle = \langle n | \mathbf{r} \nabla U | n \rangle ;$$

это и есть квантовомеханическая теорема о вироале.

Если потенциальная энергия является однородной функцией координат, т. е. если

$$U(\lambda \mathbf{r}) = \lambda^k U(\mathbf{r}),$$

то по теореме Эйлера об однородных функциях $\mathbf{r} \nabla U = k U$ и

$$2 \cdot \left\langle n \left| \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \right| n \right\rangle = k \langle n | U | n \rangle .$$

Отсюда получаем соотношения

$$\left\langle n \left| \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \right| n \right\rangle = \frac{k}{k+2} E_n, \quad \langle n | U | n \rangle = \frac{2}{k+2} E_n .$$

В классической механике для финитного движения частицы в потенциальном поле существуют аналогичные соотношения, только в левых частях этих равенств стоят соответственно кинетическая и потенциальная энергия частицы, усредненные за большой промежуток времени.

Примеры:

Для гармонического осциллятора $k = 2$, поэтому

$$\langle n | m \omega^2 x^2 | n \rangle = \left\langle n \left| \frac{\hat{p}^2}{m} \right| n \right\rangle = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) .$$

Для атома водорода $k = -1$, поэтому

$$\left\langle n \left| \frac{e^2}{r} \right| n \right\rangle = \left\langle n \left| \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m} \right| n \right\rangle = -2E_n . \quad (13.1)$$

Задачи

13.1. Объясните, почему теорема о вироале не имеет места для инфинитного движения.

13.2. Найти соотношение неопределённостей для Δx и ΔK , для ΔU и ΔK , где $\hat{K} = \hat{p}^2/(2m)$.

13.3. Для частицы, находящейся в состоянии $\psi(x, y, z)$, найти вероятность того, что ее координата x и импульс p_y расположены в пределах $x_1 < x < x_2$, $p_{y1} < p_y < p_{y2}$.

13.4. Для гамильтониана $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m) + U(\mathbf{r})$ найти коммутатор $[\hat{H}, \mathbf{r}]$. Используя этот результат, показать, что среднее значение импульса частицы для стационарного состояния в случае финитного движения равно нулю: $\langle \psi_E | \hat{\mathbf{p}} | \psi_E \rangle = 0$.

§ 14. Гайзенберговское представление

Будем рассматривать случай, когда оператор Гамильтона не зависит от времени. До сих пор (и, как правило, далее) мы используем обычное (шрёдингеровское) представление, в котором операторы $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$ и $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$ не зависят от времени t , а оператор физической величины $\hat{A}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{p}}, t)$ может зависеть от t лишь как от параметра. При этом зависимость среднего значения этой величины от времени связана в основном с волновой функцией $\Psi(\mathbf{r}, t)$, которая удовлетворяет нестационарному уравнению Шрёдингера. В некоторых случаях, однако, более удобным может оказаться *представление Гайзенберга*, в котором операторы координат и импульсов явно зависят от времени, а волновая функция, напротив, от времени не зависит. Переход к этому представлению можно произвести следующим образом.

Пусть $\psi_n(\mathbf{r})$ — волновая функция стационарного состояния с

энергией E_n , удовлетворяющая уравнению

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

Представим волновую функцию $\Psi(\mathbf{r}, t)$ в виде разложения по волновым функциям стационарных состояний

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\mathbf{r}).$$

Используя унитарный оператор

$$\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

с очевидным свойством

$$\hat{U}(t) \psi_n(\mathbf{r}) = e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\mathbf{r}),$$

это разложение можно представить в компактном виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{U}(t) \Psi(\mathbf{r}, 0)$$

или

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\Psi(0)\rangle.$$

Тогда среднее значение

$$\langle A(t) \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \Psi(\mathbf{r}, t) d^3r \equiv \langle \Psi(t) | \hat{A} | \Psi(t) \rangle,$$

можно записать так:

$$\langle A(t) \rangle = \langle \Psi(0) | \hat{A}_\Gamma(t) | \Psi(0) \rangle,$$

где

$$\hat{A}_\Gamma(t) = \hat{U}^{-1}(t) \hat{A} \hat{U}(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{A} e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (14.1)$$

— оператор в гайзенберговском представлении. Этот оператор обычно можно представить также в виде

$$\hat{A}_\Gamma(t) = \hat{A}(\mathbf{r}_\Gamma(t), \hat{\mathbf{p}}_\Gamma(t), t).$$

При $t = 0$ имеем

$$\hat{A}_\Gamma(0) = \hat{A},$$

т. е. в начальный момент времени оператор в гайзенберговском представлении совпадает с оператором в представлении Шрёдингера.

Таким образом, зависимость от времени в гайзенберговском представлении перенесена с волновых функций на операторы, что делает эту схему квантовой механики формально похожей на схему классической механики. В частности, для зависящих от времени операторов можно выписать уравнения движения, похожие на уравнения движения классической механики.

Действительно, оператор Гамильтона в гайзенберговском представлении совпадает с оператором Гамильтона в шрёдингеровском представлении:

$$\hat{H}_\Gamma = \hat{U}^{-1}(t) \hat{H} \hat{U}(t) = \hat{H}.$$

Поэтому уравнение движения для оператора $\hat{A}_\Gamma(t)$ имеет вид

$$\frac{d\hat{A}_\Gamma(t)}{dt} = \frac{\partial \hat{A}_\Gamma(t)}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_\Gamma, \hat{A}_\Gamma(t)]. \quad (14.2)$$

При сравнении этого уравнения с уравнением (12.1) видно, что квантовый аналог классической скобки Пуассона $\{H, A\}$ выражается через коммутатор:

$$\{H, A\} \rightarrow \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_\Gamma].$$

Рассмотрим в качестве примера движение гармонического осциллятора, для которого

$$\hat{H}_\Gamma = \frac{[\hat{p}_\Gamma(t)]^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 [\hat{x}_\Gamma(t)]^2.$$

Используя уравнение (2) и одновременные перестановочные соотношения

$$[\hat{p}_\Gamma(t), \hat{x}_\Gamma(t)] = -i\hbar, \quad [\hat{x}_\Gamma(t), \hat{x}_\Gamma(t)] = [\hat{p}_\Gamma(t), \hat{p}_\Gamma(t)] = 0,$$

получим операторные уравнения движения, аналогичные уравнениям Гамильтона классической механики:

$$\frac{d}{dt}\hat{x}_\Gamma(t) = -\frac{\hat{p}_\Gamma(t)}{m}, \quad \frac{d}{dt}\hat{p}_\Gamma(t) = -m\omega\hat{x}_\Gamma(t).$$

Теперь уже легко догадаться (а затем и проверить), что решениями этих уравнений являются операторы

$$\begin{aligned}\hat{x}_\Gamma(t) &= \hat{x}_\Gamma(0) \cos \omega t + \frac{\hat{p}_\Gamma(0)}{m\omega} \sin \omega t, \\ \hat{p}_\Gamma(t) &= \hat{p}_\Gamma(0) \cos \omega t - m\omega\hat{x}_\Gamma(0) \sin \omega t,\end{aligned}$$

причём

$$\hat{x}_\Gamma(0) = x, \quad \hat{p}_\Gamma(0) = \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}.$$

Задачи

14.1. Найти операторы координаты и импульса в гайзенберговском представлении для линейного гармонического осциллятора, используя унитарное преобразование, связывающее операторы физических величин в гайзенберговском и шрёдингеровском представлениях.

14.2. Найти значение “разновременного” коммутатора импульса и координаты $[\hat{p}_\Gamma(t), \hat{x}_\Gamma(t')]$ для:

- свободной частицы;
- частицы в однородном поле;
- линейного осциллятора.

14.3. Используя явный вид гайзенберговских операторов $\hat{p}_\Gamma(t)$, $\hat{x}_\Gamma(t)$ для линейного осциллятора, найти зависимость от времени следующих средних:

$$\langle x(t) \rangle, \quad \langle p(t) \rangle, \quad \langle (\Delta x(t))^2 \rangle, \quad \langle (\Delta p(t))^2 \rangle.$$

Провести явный расчёт этих средних для состояния, описываемого волновой функцией вида

$$\psi(x) = A \exp \left[\frac{ip_0x}{\hbar} - \frac{(x-x_0)^2}{2a^2} \right],$$

где x_0 и p_0 — известные константы.

§ 15. Уравнение Шрёдингера для частицы в электромагнитном поле

Рассмотрим заряженную частицу, находящуюся в электромагнитном поле, заданном скалярным $\phi(\mathbf{r}, t)$ и векторным $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ потенциалами. Классическая функция Гамильтона этой частицы

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\phi,$$

где импульс \mathbf{p} (его иногда называют обобщённым или каноническим) связан со скоростью \mathbf{v} соотношением

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} + \frac{e}{c} \mathbf{A},$$

в квантовой механике заменяется оператором

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\phi, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla.$$

При этом плотность тока равна

$$\mathbf{j} = \frac{1}{2} (\Psi^* \hat{\mathbf{v}} \Psi + \text{комп. сопр.}), \quad \hat{\mathbf{v}} = \frac{1}{m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right),$$

где $\hat{\mathbf{v}}$ — оператор скорости частицы (ср. формулу (9.1)).

Калибровочная инвариантность. В классическом случае при замене потенциалов

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla f, \quad \phi \rightarrow \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}$$

(здесь $f = f(\mathbf{r}, t)$ — произвольная однозначная функция координат и времени) электрические и магнитные поля

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

не изменяются, а значит, не изменяются и уравнения движения. В квантовой механике легко проверить, что уравнение Шрёдингера не изменяется, если кроме указанного преобразования потенциалов еще произвести и преобразование волновой функции:

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla f, \quad \phi \rightarrow \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}, \quad \Psi \rightarrow \Psi e^{ief/(\hbar c)}.$$

Задачи

15.1. Определить уровни энергии и волновые функции для заряженной частицы в постоянном и однородном магнитном поле \mathbf{B} . Выбрать векторный потенциал в виде $\mathbf{A} = (0, xB, 0)$.

15.2. Считая известным гамильтониан частицы в электромагнитном поле, найти:

- выражение для оператора скорости $\hat{\mathbf{v}}$;
- коммутационные соотношения для компонент скорости;
- выражение для оператора

$$m \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{dt}$$

(операторный аналог уравнения Ньютона);

г) показать, что в постоянном и однородном магнитном поле $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ операторы

$$\hat{x}_0 = x + \frac{\hat{v}_y}{\omega} \quad \hat{y}_0 = y - \frac{\hat{v}_x}{\omega}$$

соответствуют сохраняющимся величинам, но не могут быть измерены одновременно (здесь $\omega = eB/(mc)$). В классиче-

ской электродинамике эти величины соответствуют координатам центра окружности, по которой движется заряженная частица.

§ 16. Оператор сдвига. Периодическое поле. Теорема Блоха

16.1. Оператор сдвига

Оператор \hat{T}_a сдвига на расстояние a определяется соотношением

$$\hat{T}_a \psi(x) \equiv \psi(x + a).$$

Так как

$$\psi(x + a) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} \left(\frac{d}{dx} \right)^n \psi(x),$$

то оператор сдвига может быть выражен через оператор импульса

$$\hat{T}_a = e^{ia\hat{p}/\hbar}.$$

Оператор сдвига неэрмитов, так как

$$\hat{T}_a^+ = e^{-ia\hat{p}/\hbar} = \hat{T}_a^{-1} \neq \hat{T}_a.$$

Обратим внимание на то, что при бесконечно малом сдвиге $\delta a \rightarrow 0$ оператор сдвига имеет вид

$$\hat{T}_{\delta a} = 1 + i \frac{\delta a}{\hbar} \hat{p},$$

т. е. оператор импульса $\hat{p} \equiv \hat{p}_x$ является инфинитезимальным оператором для сдвига вдоль оси x .

16.2. Оператор сдвига и движение свободной частицы

Для свободной частицы оператор Гамильтона $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$ коммутирует с оператором сдвига:

$$[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0, \quad (16.1)$$

потому операторы \hat{H} и \hat{T}_a имеют совместные собственные функции

$$\hat{H}\psi_{E\lambda}(x) = E\psi_{E\lambda}(x), \quad \hat{T}_a\psi_{E\lambda}(x) = \lambda\psi_{E\lambda}(x) \quad (16.2)$$

в виде плоской волны

$$\psi_k(x) \equiv \psi_{E\lambda}(x) = A e^{ikx} \quad (16.3)$$

с собственными значениями

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \lambda = e^{ika}. \quad (16.4)$$

Импульс тоже коммутирует с \hat{H} и \hat{T}_a и имеет в состоянии (3) собственное значение $p = \hbar k$. Для свободного движения уровни энергии двукратно вырождены: плоские волны с импульсами $+\hbar k$ и $-\hbar k$ отвечают одной и той же энергии, но разным значениям плотности тока $j_x = \pm(\hbar k/m)|A|^2$.

16.3. Движение в периодическом поле

Если потенциальная энергия является периодической функцией с периодом a :

$$U(x+a) = U(x),$$

то оператор сдвига на расстояние a коммутирует с гамильтонианом $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) + U(x)$, т. е. удовлетворяет уравнению (1). Поэтому и в периодическом поле собственные функции стационарных состояний могут быть выбраны в таком виде $\psi_{E\lambda}(x)$,

что они одновременно являются и собственными функциями оператора сдвига, т. е. удовлетворяют уравнениям (2). Конечно, импульс не сохраняется в периодическом поле, так как $[\hat{H}, \hat{p}] \neq 0$, поэтому плоская волна (3) не является теперь решением уравнений (2). Покажем, что в качестве ограниченного решения уравнений (2) возникает своеобразная “модулированная плоская волна” вида (3), в которой вместо постоянной амплитуды A стоит периодическая функция с периодом a , и оба собственных значения E и λ можно (как и в случае свободного движения) выразить через одну и ту же величину $\hbar q$, называемую квазиимпульсом.

Для этого потребуем, чтобы функция $\psi_{E\lambda}(x)$ была конечной при $x \rightarrow \pm\infty$, тогда из соотношения

$$\psi_{E\lambda}(x \pm na) = \lambda^{\pm n} \psi_{E\lambda}(x)$$

следует $|\lambda| = 1$, т. е. λ можно представить в виде

$$\lambda = e^{iqa}.$$

Вещественную величину $\hbar q$ в этом случае называют **квазиимпульсом**. Обратим внимание на то, что квазиимпульсы $\hbar q$ и $\hbar(q + 2\pi n/a)$ при $n = \pm 1, \pm 2, \dots$ соответствуют одному и тому же значению λ (в теории твердого тела величину $2\pi/a$ называют *вектором обратной решетки*). Все возможные значения λ можно учесть, выбрав величину q из интервала

$$-\frac{\pi}{a} < q \leq +\frac{\pi}{a}.$$

В случае свободного движения (при $U(x) = 0$) квазиимпульс совпадает с истинным импульсом. Уровни энергии в периодическом поле являются вырожденными, и квазиимпульс является удобной характеристикой вырожденных состояний.

Если теперь такое решение переписать в виде

$$\psi_{E\lambda}(x) = u_q(x) e^{iqx},$$

то из соотношения

$$\psi_{E\lambda}(x+a) = e^{iqa} \psi_{E\lambda}(x)$$

следует периодичность функции $u_q(x)$:

$$u_q(x+a) = u_q(x).$$

Это утверждение называется **теоремой Блоха**, а решение

$$\psi_q(x) \equiv \psi_{E\lambda}(x) = u_q(x) e^{iqa}, \quad (16.5)$$

действительно, имеет вид “модулированной плоской волны”.

Задача

16.1. Для свободного движения частицы волновая функция $\psi(x) = A \cos(x/b)$ является собственной функцией \hat{H} , но не \hat{T}_a и \hat{p} , хотя $[\hat{H}, \hat{T}_a] = [\hat{H}, \hat{p}] = 0$. Как согласуется этот факт с утверждением о том, что коммутирующие операторы имеют совместные собственные функции?

§ 17. Пример: периодическое поле дельта ям

Пусть частица движется в периодическом потенциальном поле

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

Несмотря на свою простоту, такое поле является содержательной моделью кристаллической решётки твёрдого тела. Мы рассмотрим здесь лишь случай $E < 0$. Всюду вне δ -ям в качестве независимых решений уравнения Шрёдингера можно выбрать $e^{\varkappa x}$ и $e^{-\varkappa x}$ или $\text{sh } \varkappa x$ и $\text{ch } \varkappa x$, где $\hbar \varkappa = \sqrt{2|E|m}$. Мы предпочтём следующую комбинацию:

$$\psi_{E\lambda}(x) = A [\lambda \text{sh } \varkappa x + \text{sh } \varkappa(a-x)] \quad \text{при } 0 < x < a. \quad (17.1)$$

Ясно, что это есть решение уравнения Шрёдингера, так как и $\text{sh } \varkappa x$ и $\text{sh } \varkappa(a-x)$ являются таковыми. Кроме того, у данной комбинации есть ещё одно очевидное свойство:

$$\psi_{E\lambda}(a) = \lambda \psi_{E\lambda}(0).$$

Для остальных значений x волновую функцию можно получить, учитывая, что она является собственной функцией оператора сдвига с собственным значением λ :

$$\psi_{E\lambda}(x) = \lambda^n \psi_{E\lambda}(x - na) \quad \text{при } na < x < (n+1)a. \quad (17.2)$$

В частности, на участке $-a < x < 0$ отсюда имеем

$$\psi_{E\lambda}(x) = \lambda^{-1} \psi_{E\lambda}(x+a) = A [-\lambda^{-1} \text{sh } \varkappa x + \text{sh } \varkappa(a+x)]. \quad (17.3)$$

Видно, что функции (1) и (3) совпадают при $x = 0$, а условия сшивки (5.1) при $x = 0$,

$$\frac{\psi'(\varepsilon)}{\psi(\varepsilon)} - \frac{\psi'(-\varepsilon)}{\psi(-\varepsilon)} = -\frac{2mG}{\hbar^2},$$

приводят к уравнению

$$\frac{1}{2} (\lambda + \lambda^{-1}) = \text{ch } \varkappa a - \frac{\varkappa_0}{\varkappa} \text{sh } \varkappa a, \quad \varkappa_0 = \frac{mG}{\hbar^2}. \quad (17.4)$$

Таким образом, волновая функция, определённая соотношениями (1) и (3), является собственной функцией операторов \hat{H} и \hat{T}_a с собственными значениями

$$E = -\frac{\hbar^2 \varkappa^2}{2m} \quad \text{и} \quad \lambda = e^{iqa}$$

только при определённой связи между E и λ вида (4):

$$\cos qa = \text{ch } \varkappa a - \frac{\varkappa_0}{\varkappa} \text{sh } \varkappa a. \quad (17.5)$$

Это уравнение определяет зависимость энергии E от квазиимпульсом $\hbar q$, являясь аналогом дисперсионного уравнения для связи энергии и импульса.

Оба собственных значения E и λ выражаются через одну величину q , поэтому в волновой функции $\psi_{E\lambda}(x)$ достаточно указать лишь одно значение q для полной характеристики состояния

$$\psi_{E\lambda}(x) \equiv \psi_q(x),$$

где

$$\psi_q(x) = A [e^{iqa} \operatorname{sh} \kappa x + \operatorname{sh} \kappa(a-x)] \quad \text{при } 0 < x < a,$$

$$\psi_q(x) = e^{iqna} \psi_q(x-na) \quad \text{при } na < x < (n+1)a,$$

Для состояния $\psi_q(x)$ плотность тока равна

$$j_x = \frac{\hbar \kappa}{2m} |A|^2 \operatorname{sh} \kappa a \sin qa. \quad (17.6)$$

Из уравнений (5) и (6) видно, что волновым функциям $\psi_q(x)$ и $\psi_{-q}(x)$ соответствует одна и та же энергия, но разные по знаку значения плотности тока.

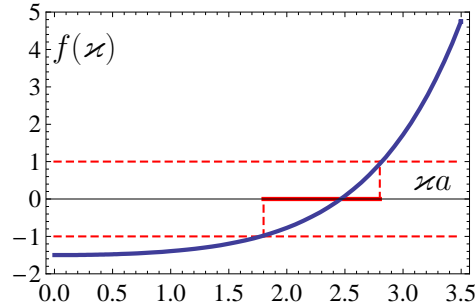


Рис. 11. График функции (17.7) при $\kappa_0 a = 2.5 > 2$

Графики правой части уравнения (5),

$$\operatorname{ch} \kappa a - \frac{\kappa_0}{\kappa} \operatorname{sh} \kappa a \equiv f(\kappa), \quad (17.7)$$

показаны на рис. 11 и 12; при этом учтено, что $f(0) = 1 - \kappa_0 a$ и $f(\kappa_0) = \exp(-\kappa_0 a) < 1$. Из этих графиков видно, что при

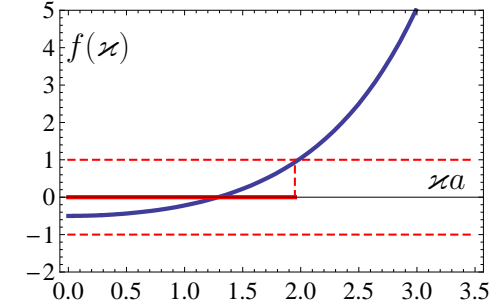


Рис. 12. График функции (17.7) при $\kappa_0 a = 1.5 < 2$

$\kappa_0 a > 2$ любому значению $\cos qa$ из интервала $-1 < \cos qa < 1$ соответствует определенное значение κ , все эти значения отмечены жирной линией на оси κa и заполняют целую полосу вблизи κ_0 . Таким образом, в этом случае спектр допустимых значений энергии в области $E < 0$ представляет собой целую зону (её называют *разрешённой зоной*), включающую значение

$$E_0 = -\frac{\hbar^2 \kappa_0^2}{2m} = -\frac{mG^2}{2\hbar^2} \quad (17.8)$$

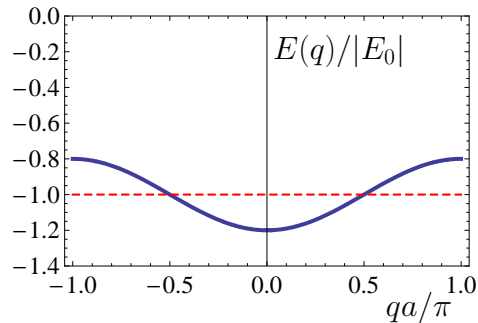
для энергии частицы в одной δ -яме. При $\kappa_0 a < 2$ (см. рис. 12) разрешённая зона примыкает снизу к области положительных энергий.

При $\kappa_0 a = mGa/\hbar^2 \gg 1$ график функции $f(\kappa)$ очень круто пересекает ось κ в районе $\kappa = \kappa_0$, и потому вся разрешённая зона представляет собой узкую полосу вблизи значения E_0 из (8). Перепишем уравнение (5) в виде

$$\kappa = \frac{\kappa_0}{\operatorname{cth} \kappa a - \cos qa / (\operatorname{sh} \kappa a)}.$$

Учитывая, что $\kappa a \approx \kappa_0 a \gg 1$ и потому

$$\operatorname{cth} \kappa a \approx 1 + 2e^{-2\kappa_0 a}, \quad \operatorname{sh} \kappa a \approx \frac{1}{2} e^{\kappa_0 a},$$

Рис. 13. График функции $E(q)$ (см. уравнение (17.9))

получим

$$\kappa \approx \frac{\kappa_0}{1 - 2e^{-\kappa_0 a} \cos qa} \approx \kappa_0 (1 + 2e^{-\kappa_0 a} \cos qa).$$

Отсюда находим в явном виде зависимость энергии E от квазиимпульса $\hbar q$ (рис. 13):

$$E(q) = E_0 (1 + 4e^{-\kappa_0 a} \cos qa). \quad (17.9)$$

Разрешённая зона расположена симметрично относительно E_0 и имеет малую ширину

$$\Delta E = 8|E_0|e^{-\kappa_0 a}.$$

Представив при малых q зависимость энергии от квазиимпульса (9) в виде

$$E = \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\text{эф}}} + \text{const},$$

найдем *эффективную массу* частицы

$$m_{\text{эф}} = \frac{m}{2(\kappa_0 a)^2} e^{\kappa_0 a}.$$

В рассматриваемом случае (при $\kappa_0 a \gg 1$) эффективная масса много больше обычной массы m . Построим волновой пакет из волновых функций $\psi_q(x)$ со средним значением q_0 ; можно

показать, что групповая скорость движения этого пакета определяется величиной

$$\left. \frac{\partial E}{\partial(\hbar q)} \right|_{q_0} = \frac{\hbar q_0}{m_{\text{эф}}}$$

и является малой по сравнению с величиной $\hbar q_0/m$.

Задача

17.1. Повторите рассмотрение, аналогичное проведённому в § 17, для случая $E > 0$.

§ 18. Квазиклассическое приближение

18.1. Условия применимости

Подставив в уравнение Шрёдингера

$$-\hbar^2 \psi''(x) = p^2(x) \psi(x), \quad p(x) \equiv \sqrt{2m[E - U(x)]}$$

волновую функцию в виде

$$\psi(x) = e^{iS(x)/\hbar},$$

найдем уравнение для функции $S(x)$:

$$(S'(x))^2 = p^2(x) + i\hbar S''(x).$$

Если отбросить последнее слагаемое, то получим классическое уравнение Гамильтона – Якоби, в котором $S(x)$ — действие как функция координат. Решение этого уравнения

$$S_{\text{класс}}(x) = \pm \int_{x_0}^x p(x) dx.$$

Таким образом, переход к классической механике происходит, когда

$$(S'(x))^2 \gg \hbar |S''(x)| \quad \text{или} \quad \left| \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| \ll 1, \quad (18.1)$$

где $\lambda(x) = \hbar/p(x)$ — приведённая длина волны де Бройля, соответствующая импульсу $p(x)$, иначе,

$$\Delta\lambda \sim \lambda \left| \frac{d\lambda}{dx} \right| \ll \lambda,$$

т. е. изменение длины волны $\Delta\lambda(x)$ на расстоянии порядка $\lambda(x)$ должно быть много меньше длины волны.

Другая форма критерия — классическое действие должно быть велико по сравнению с квантом действия, т. е.

$$\left| \int_{x_0}^x p(x) dx \right| \gg \hbar.$$

Подчеркнем, наконец, что переход к квазиклассическому пределу в квантовой механике — это аналог перехода к пределу геометрической оптики в оптике волновой. И критерии применимости этих пределов общие: длина волны λ должна быть много меньше, чем характерные расстояния a , на которых меняется потенциал (в оптике — коэффициент преломления):

$$\frac{\lambda}{a} \ll 1 \quad \text{или} \quad ka \gg 1.$$

18.2. Квазиклассические решения

В классической механике вероятность найти частицу на интервале dx пропорциональна dt — времени пребывания частицы на этом интервале, поэтому плотность вероятности пропорциональна dt/dx , или

$$\frac{dW_{\text{класс}}}{dx} \propto \frac{1}{v(x)},$$

где $v(x) = p(x)/m$ — классическая скорость частицы с координатой x . В квантовой механике при $U(x) = \text{const}$ точное решение уравнения Шрёдингера имеет вид

$$\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx},$$

где $\hbar k = p$. Естественно ожидать, что для движения частицы в достаточно плавно изменяющемся поле приближенное решение выглядит так:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{k(x)}} \left(C_1 e^{i \int_{x_0}^x k(x) dx} + C_2 e^{-i \int_{x_0}^x k(x) dx} \right),$$

$$\hbar k(x) = p(x) = \sqrt{2m[E - U(x)]}. \quad (18.2)$$

Чтобы показать это, подставим

$$\psi(x) = e^{iS(x)/\hbar}, \quad S(x) = S_0(x) + \frac{\hbar}{i} S_1(x) + \dots$$

в уравнение Шрёдингера и удержим члены до первого порядка по \hbar :

$$(S_0')^2 - 2i\hbar S_0' S_1' - i\hbar S_0'' = p^2(x).$$

Отсюда

$$S_0(x) = S_{\text{класс}}(x) = \pm \int p(x) dx, \quad S_1' = -\frac{1}{2} \frac{S_0''}{S_0'} = -\frac{1}{2} \frac{d}{dx} \ln p(x),$$

т. е.

$$S_1(x) = \ln \frac{1}{\sqrt{p(x)}} + \text{const},$$

что и приводит к (2).

Аналогичное рассмотрение в классически недоступной области даёт квазиклассическое решение вида

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\chi(x)}} \left(C_3 e^{\int_{x_0}^x \chi(x) dx} + C_4 e^{-\int_{x_0}^x \chi(x) dx} \right),$$

$$\hbar \chi(x) = \sqrt{2m[U(x) - E]}. \quad (18.3)$$

§ 19. Правила квантования Бора – Зоммерфельда

Рассмотрим движение частицы в потенциальном поле вида рис. 14 и будем предполагать, что условия применимости квазиклассического приближения (18.1) выполнены всюду, кроме малых окрестностей классических точек поворота $x = a$ и $x = b$. В квазиклассическом приближении волновая функция связанного состояния при $x < a$ (область A на рис. 14) — это

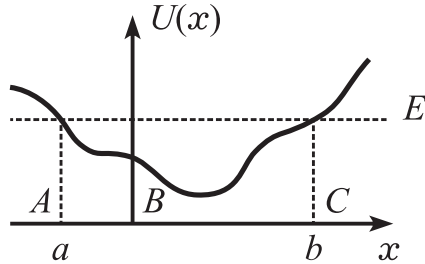


Рис. 14. Квазиклассическая потенциальная яма

волна, затухающая при $x \rightarrow -\infty$:

$$\psi_A(x) = \frac{A}{\sqrt{\varkappa}} \exp\left(-\int_x^a \varkappa dx\right); \quad (19.1)$$

при $x > b$ (область C на рис. 14), аналогично,

$$\psi_C(x) = \frac{C}{\sqrt{\varkappa}} \exp\left(-\int_b^x \varkappa dx\right). \quad (19.2)$$

В классически доступной области $a < x < b$ волновую функцию можно записать в виде стоячей волны

$$\psi_B(x) = \frac{B}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_a^x k dx + \alpha\right). \quad (19.3)$$

Связь коэффициентов A , B , C и значение фазы α могут быть найдены из условия сшивки решений (1)–(3). Правила сшивки (см. [1], § 47) сводятся к следующему.

При переходе точки поворота a

$$\frac{1}{\sqrt{\varkappa}} \exp\left(-\int_x^a \varkappa dx\right) \rightarrow \frac{2}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_a^x k dx + \frac{\pi}{4}\right), \quad (19.4)$$

а при переходе точки поворота b

$$\frac{1}{\sqrt{\varkappa}} \exp\left(-\int_b^x \varkappa dx\right) \rightarrow \frac{2}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_x^b k dx + \frac{\pi}{4}\right). \quad (19.5)$$

Из условия сшивки (4) находим:

$$\psi_B(x) = \frac{2A}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_a^x k dx + \frac{\pi}{4}\right). \quad (19.6)$$

Перепишав аргумент синуса в виде

$$\begin{aligned} \int_a^x k dx + \frac{\pi}{4} &= \int_a^b k dx + \int_b^x k dx + \frac{\pi}{4} = \\ &= -\int_x^b k dx - \frac{\pi}{4} + \beta, \end{aligned}$$

где

$$\beta = \int_a^b k dx + \frac{\pi}{2},$$

представим $\psi_B(x)$ в форме, удобной для сравнения с (5):

$$\begin{aligned} \psi_B(x) &= -\frac{2A}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_x^b k dx + \frac{\pi}{4} - \beta\right) = \\ &= -\frac{2A}{\sqrt{k}} \left[\sin\left(\int_x^b k dx + \frac{\pi}{4}\right) \cos \beta - \cos\left(\int_x^b k dx + \frac{\pi}{4}\right) \sin \beta \right], \end{aligned}$$

Сравнивая теперь эту формулу с уравнением (5), находим, что $\sin \beta = 0$, или

$$\beta = (n+1)\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad C = (-1)^n A.$$

Таким образом, получаем **правило квантования Бора – Зоммерфельда**:

$$\oint p(x) dx = 2 \int_a^b \sqrt{2m[E_n - U(x)]} dx = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right).$$

В $\psi_B(x)$ фаза меняется от $\frac{\pi}{4}$ при $x = a$ до

$$\int_a^b k(x) dx + \frac{\pi}{4} = \pi \left(n + \frac{3}{4}\right)$$

при $x = b$, так что волновая функция, отвечающая уровню E_n , имеет, в соответствии с осцилляционной теоремой, n нулей (узлов стоячей волны).

Рассмотрим теперь многомерное движения с разделяющимися переменными. В этом случае адиабатические инварианты в пределе больших квантовых чисел $n_j \gg 1$ будут удовлетворять правилам квантования:

$$\oint p_j(x) dq_j = 2\pi\hbar n_j, \quad j = 1, 2, \dots, s.$$

Отсюда видно, что зависимость от квантовых чисел любых физических величин в квазиклассическом пределе возникает только в комбинации $\hbar n_j$, т. е. полная степень квантовых чисел совпадает со степенью \hbar .

Фазовая площадь $\oint p(x) dx$ растет линейно с ростом числа состояний n , так что в фазовом пространстве на каждое состояние приходится площадь $2\pi\hbar$, а **число состояний в фазовой ячейке** $\Delta x \cdot \Delta p_x$ равно

$$\Delta n = \frac{\Delta x \cdot \Delta p_x}{2\pi\hbar}.$$

Так как волновая функция быстро убывает при $x < a$ и $x > b$, то **нормировка волновой функции** может быть проведена

только по области $a < x < b$:

$$1 \approx \int_a^b \frac{B^2}{k} \sin^2 \left(\int_a^x k dx + \frac{\pi}{4} \right) dx \approx \frac{B^2}{2} \int_a^b \frac{dx}{k(x)} = \frac{B^2 \hbar \pi}{2m\omega},$$

где

$$\frac{2\pi}{\omega} = T_{\text{класс}} = 2 \int_a^b \frac{dx}{v(x)}$$

— классический период колебаний. Отсюда

$$B = \sqrt{\frac{2m\omega}{\pi\hbar}}.$$

В квазиклассике $n \gg 1$, так что при $\Delta n \ll n$ получаем

$$E_{n+\Delta n} - E_n \approx \frac{dE_n}{dn} \Delta n.$$

Продифференцируем по n правило квантования, тогда

$$2\pi\hbar = \oint \frac{\partial p}{\partial E_n} \frac{dE_n}{dn} dx = \oint \frac{dx}{v(x)} \cdot \frac{dE_n}{dn} = T_{\text{класс}} \frac{dE_n}{dn}.$$

Отсюда разность близких уровней составляет

$$E_{n+\Delta n} - E_n \approx \frac{dE_n}{dn} \Delta n = \frac{2\pi\hbar}{T_{\text{класс}}} \cdot \Delta n = \hbar\omega \Delta n,$$

а разность соседних уровней (при $\Delta n = 1$) равна

$$E_{n+1} - E_n \approx \hbar\omega.$$

Иными словами, **в каждом небольшом участке квазиклассической части спектра уровни энергии эквидистантны.**

Задачи

19.1. Получить квазиклассическое выражение для уровней энергии частицы в однородном поле тяжести в случае, когда ее движение ограничено снизу идеально отражающей плоскостью. Указать условие применимости полученного результата.

19.2. Для частицы, находящейся в поле

$$U(x) = U_0 \left| \frac{x}{a} \right|^\nu; \quad U_0 > 0, \quad \nu > 0,$$

найти в квазиклассическом приближении, как изменяется расстояние между соседними уровнями энергии с увеличением n в зависимости от значения параметра ν . Какова плотность состояний дискретного спектра?

19.3. Найти волновые функции $\psi_n(x)$ для гармонического осциллятора при $n \gg 1$. Дать график $|\psi_n(x)|^2$ и сравнить его с графиком классической плотности вероятности

$$\frac{dW_{\text{класс}}(x)}{dx} = \frac{2}{v(x)T_{\text{класс}}},$$

где $T_{\text{класс}} = 2\pi/\omega$ — классический период движения. Сравнить также эти величины для состояния $n = 0$.

§ 20. Подбарьерное прохождение. Двойная яма

20.1. Подбарьерное прохождение

Для прямоугольного барьера (рис. 10) коэффициент прохождения

$$D \approx e^{-2\kappa a}.$$

Отсюда для плавного барьера (рис. 15) находим

$$D \approx \prod_i \exp[-2\kappa(x_i)\Delta x_i] = e^{-2 \int_a^b \kappa(x) dx}.$$

Критерий применимости этой формулы обычный:

$$\int_a^b |p(x)| dx \gg \hbar.$$

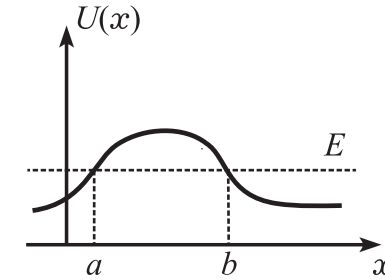


Рис. 15. Квазиклассический барьер

20.2. Двойная яма

См. [1], задача 3 к § 50: Поле $U(x)$ представляет собой две симметричные потенциальные ямы, разделенные барьером. Если бы барьер был непроницаем для частицы, то существовали бы уровни энергии, отвечающие движению частицы только в одной или в другой яме, одинаковые для обеих ям. Возможность перехода через барьер приводит к расщеплению каждого из этих уровней на два близких уровня, соответствующих состояниям, в которых частица находится одновременно в обеих ямах. Определить величину расщепления (поле $U(x)$ предполагается квазиклассическим).

Дополнительно покажите, что если

$$\Psi(x, t = 0) = \psi_0(x)$$

(частица в начальный момент находится в правой яме), то

$$\Psi(x, t) = e^{-iE_0 t/\hbar} \left[\psi_0(x) \cos \frac{t}{\tau} + i \psi_0(-x) \sin \frac{t}{\tau} \right],$$

где $\tau = 2\hbar/\Delta E$. Таким образом, через время $\pi\tau/2$ частица окажется в левой яме, через время $\pi\tau$ — снова в правой яме и т. д.

Задачи

20.1. Вычислить в квазиклассическом приближении коэффициент прохождения электронов через поверхность металла под действием сильного электрического поля \mathcal{E} (“холодная эмиссия”). Найти границы применимости расчета. Оценить плотность тока через поверхность металла при $E \sim -2$ эВ, $\mathcal{E} \sim 10^6$ В/см.

20.2. Найти расщепление основного состояния в двойной яме. Потенциал каждой ямы вблизи минимума аппроксимируется осцилляторным, барьер по-прежнему считается квазиклассическим. Сравнить ответы для этой задачи и для задачи 3 к § 50 из [1].

§ 21. Квазистационарные состояния

Возбужденные состояния многих квантовых систем (атомов, молекул, ядер и т. д.) при учете взаимодействия с электромагнитным полем становятся нестационарными и система переходит в другое состояние с испусканием фотонов. Нестационарными являются также многие ядра, испытывающие α - или β -распады. Если неопределённость энергии системы ΔE много меньше ее среднего значения E_n , то такое состояние называют **квазистационарным**, а величину E_n называют энергией квазистационарного состояния.

Закон распада: число распавшихся за время dt частиц $dN(t)$ пропорционально числу имеющихся в данный момент частиц $N(t)$ и интервалу времени dt , т. е.

$$dN(t) = -\gamma N(t) dt,$$

где γ — коэффициент пропорциональности. Отсюда получаем

$$N(t) = N(0) e^{-\gamma t}. \quad (21.1)$$

В силу соотношения неопределённостей дисперсия энергии такого квазистационарного состояния $\Delta E \sim \hbar\gamma$.

Определение: **время жизни** квазистационарного состояния

$$\tau = \frac{1}{\gamma},$$

его **ширина**

$$\Gamma = \hbar\gamma = \frac{\hbar}{\tau}.$$

Часто используют также понятие периода полураспада $T_{1/2}$, определённого соотношением

$$\frac{N(T_{1/2})}{N(0)} = \frac{1}{2}, \quad T_{1/2} = \tau \ln 2 \approx 0,7\tau.$$

Пусть распадающееся состояние описывается волновой функцией $\Psi(x, t)$, которая в начальный момент принимает значение $\Psi(x, 0)$. Вероятность $W(t)$ системе остаться в начальном состоянии через время $t > 0$ определяется амплитудой

$$a(t) = \int dx \Psi^*(x, 0) \cdot \Psi(x, t), \quad W(t) = |a(t)|^2.$$

Для стационарного состояния:

$$\Psi(x, t) = \psi_{E_n}(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad a(t) = e^{-iE_n t/\hbar}, \quad W(t) = 1.$$

Для квазистационарного состояния естественно ожидать, что

$$\Psi(x, t) \propto e^{-iE_n t/\hbar} e^{-t/(2\tau)}, \quad (21.2a)$$

$$a(t) = e^{-iE_n t/\hbar} e^{-t/(2\tau)}, \quad W(t) = e^{-\Gamma t/\hbar}. \quad (21.2b)$$

Такая временная зависимость волновой функции отвечает спектральному составу состояния вида

$$\int_0^\infty a(t) e^{i\omega t} dt \propto \frac{1}{\hbar\omega - E_n + \frac{i}{2}\Gamma}. \quad (21.3)$$

Покажем, как можно получить эти результаты.

Состояние $\Psi(x, t)$, конечно, не является стационарным и представляет собой суперпозицию стационарных состояний $\psi_E(x)$:

$$\Psi(x, t) = \int c_E e^{-iEt/\hbar} \psi_E(x) dE, \quad (21.4)$$

где коэффициенты

$$c_E = \int \psi_E^*(x) \Psi(x, 0) dx$$

определяют плотность вероятности в энергетическом представлении

$$\frac{dW(E)}{dE} = |c_E|^2.$$

Подставим (4) и аналогичное выражение для $\Psi(x, 0)$ в амплитуду $a(t)$:

$$a(t) = \int \left[\int c_{E'}^* \psi_{E'}^*(x) dE' \right] \cdot \left[\int c_E e^{-iEt/\hbar} \psi_E(x) dE \right] dx,$$

проведем интегрирование по x

$$\int \psi_{E'}^*(x) \psi_E(x) dx = \delta(E - E')$$

и далее по E' . В итоге получим важное соотношение

$$a(t) = \int |c_E|^2 e^{-iEt/\hbar} dE, \quad (21.5)$$

т. е. **временной закон распада определяется энергетическим распределением начального состояния** (Фок и Крылов, 1947).

Рассмотрим модель, в которой распределение по энергии имеет резонансный характер типа (3), т. е. сосредоточено вблизи значения E_n в интервале $\Delta E \sim \Gamma$ (рис. 16):

$$|c_E|^2 = \frac{dW}{dE} = \frac{\Gamma}{2\pi[(E - E_n)^2 + (\Gamma/2)^2]}. \quad (21.6)$$

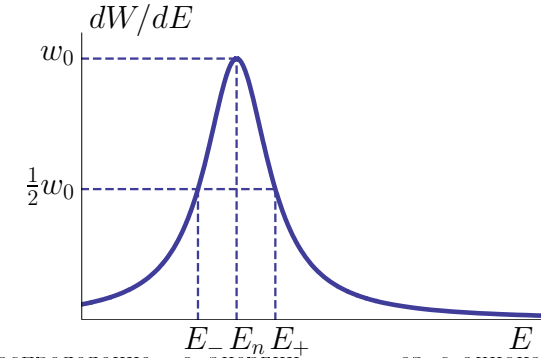


Рис. 16. Распределение по энергии для квазистационарного состояния (здесь $w_0 = 2/(\pi\Gamma)$ и $E_{\pm} = E_n \pm \frac{1}{2}\Gamma$)

Подставим это значение в (5) и заменим интеграл по вещественной переменной E в пределах от $-\infty$ до $+\infty$ на замкнутый контур, содержащий вещественную ось и полуокружность радиуса $R \rightarrow \infty$ в нижней (при $t > 0$) полуплоскости. Взяв вычет в нижней полуплоскости комплексной переменной E в точке²

$$E = E_n - \frac{1}{2}\Gamma, \quad (21.7)$$

мы получим $a(t)$ и $W(t)$ в согласии с формулой (2).

При $\Gamma \rightarrow 0$ имеем:

$$\frac{dW}{dE} \rightarrow \delta(E - E_n),$$

и состояние переходит в стационарное состояние с энергией E_n .

²Формулу (7) иногда интерпретируют таким образом: квазистационарное состояние можно формально рассматривать как состояние с комплексной энергией $E = E_n - \frac{1}{2}\Gamma$, в которой мнимая часть определяет ширину состояния.

Задача

21.1. Найти положение и ширину квазистационарных состояний в поле

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0 \\ G\delta(x-a) & \text{при } x > 0. \end{cases}$$

Специально обсудить случай малопроницаемого барьера (при $G \gg \hbar^2/(ma)$, ср. с задачей 4.56 из [4]).

§ 22. Модель α -распада

У тяжелых α -активных ядер время жизни изменяется в очень широких пределах $\tau \sim 10^{-7} \text{ с} \div 10^{17} \text{ лет}$, а энергия вылетающих α -частиц, напротив, изменяется в очень узком интервале $E = 4 \div 9 \text{ МэВ}$. Экспериментально установлена очень сильная зависимость периода полураспада $T_{1/2}$ от энергии вылетающих α -частиц E (закон Гейгера – Неттола):

$$\lg T_{1/2} = -A + \frac{B}{\sqrt{E}},$$

где A и B — константы, слабо зависящие от заряда ядра Z (для $Z = 90$ известно $A = 51,94$; $B = 139,4 \text{ МэВ}^{1/2}$, если $T_{1/2}$ в секундах). Объяснение особенностей α -распада было дано в квантовой механике (Г. Гамов, 1928).

Пусть α -частица движется в потенциальном поле вида рис. 17, где на малых расстояниях действуют притягивающие ядерные силы, а на больших расстояниях — кулоновское отталкивание. При $b \rightarrow \infty$ уровень E_n — обычное стационарное состояние с $\Gamma = 0$. Конечность барьера приводит к конечному времени жизни τ и $\Delta E \sim \Gamma$. Оценку времени жизни можно провести следующим образом: α -частица подходит к граничной

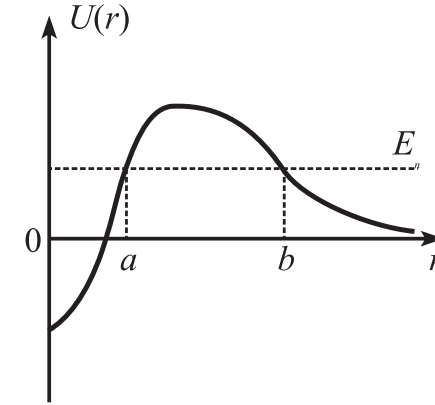


Рис. 17. Потенциальная энергия, соответствующая случаю α -распада

точке a в среднем $1/T_{\text{класс}}$ раз в секунду, где

$$T_{\text{класс}} = 2 \int_0^a \frac{dr}{v(r)},$$

и просачивается через барьер с вероятностью, равной коэффициенту прохождения D . Таким образом, для времени жизни получаем оценку

$$\tau \sim \frac{T_{\text{класс}}}{D}.$$

Такой же ответ получается и в квазиклассическом приближении. Расчет в этом случае удобно проводить в следующей постановке. Ищется стационарное решение с волновой функцией, соответствующей стоячей волне в области $0 < r < a$ и суперпозиции двух бегущих волн:

$$\psi(r) \propto A(E)e^{ikr} + B(E)e^{-ikr} \quad \text{при } r \rightarrow \infty. \quad (22.1)$$

Потребуем, чтобы коэффициент $B(E)$ обращался в нуль,

$$B(E) = 0, \quad (22.2)$$

что соответствует вылетанию частиц из области $r < a$. Такое требование выполняется только для комплексных значений энергии вида (21.7). Полученное таким образом решение соответствует квазистационарному состоянию с шириной, определяемой мнимой частью найденного значения энергии.

Задача

22.1. Показать, что для α -частиц, движущихся в модельном потенциале

$$U(r) = \begin{cases} 0 & \text{при } r < a \\ \alpha/r & \text{при } r > a \end{cases}$$

и при условии $E \ll \alpha/a$, должен выполняться закон Гейгера – Неттола, и найти вид коэффициентов A и B через параметры задачи.

Глава III

МОМЕНТ ИМПУЛЬСА. ЦЕНТРАЛЬНОЕ ПОЛЕ

§ 23. Момент импульса

23.1. Сдвиг и поворот

Операции сдвига и поворота имеют ряд общих черт. Для одной частицы оператор сдвига определяется соотношением

$$\hat{T}_{\mathbf{a}} \psi(\mathbf{r}) \equiv \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$$

и соответствует³ сдвигу системы координат на расстояние \mathbf{a} или сдвигу частицы на расстояние $(-\mathbf{a})$. В § 16 показано, что оператор сдвига связан с оператором импульса $\hat{\mathbf{p}}$ соотношением

$$\hat{T}_{\mathbf{a}} = e^{i\mathbf{a}\hat{\mathbf{p}}/\hbar}.$$

³Для скалярной (не обладающей спином) частицы преобразованная волновая функция в новых координатах $\psi'(\mathbf{r}')$ должна совпадать с исходной волновой функцией в старых координатах $\psi(\mathbf{r})$, т. е. должны выполняться равенства

$$\psi'(\mathbf{r}') = \hat{T}_{\mathbf{a}} \psi(\mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}' + \mathbf{a}) = \psi(\mathbf{r}).$$

Отсюда следует, что $\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{a}$, т. е. оператор $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ соответствует сдвигу системы координат на расстояние \mathbf{a} . Сама частица при этом смещается на расстояние $(-\mathbf{a})$, в частности, средние значения оператора \mathbf{r} в состояниях $\psi'(\mathbf{r})$ и $\psi(\mathbf{r})$ связаны соотношениями

$$\langle \psi'(\mathbf{r}) | \mathbf{r} | \psi'(\mathbf{r}) \rangle = \langle \psi(\mathbf{r}) | \hat{T}_{\mathbf{a}}^{-1} \mathbf{r} \hat{T}_{\mathbf{a}} | \psi(\mathbf{r}) \rangle = \langle \psi(\mathbf{r}) | \mathbf{r} | \psi(\mathbf{r}) \rangle - \mathbf{a}.$$

Рассмотрим поворот на угол $\boldsymbol{\theta} = \theta \mathbf{n}$, где единичный вектор \mathbf{n} задает направление оси поворота. Пусть при таком повороте компоненты вектора \mathbf{r} преобразуются по закону

$$x'_i = \sum_{k=1}^3 \Lambda_{ik} x_k,$$

где Λ — ортогональная матрица поворота, $\Lambda^T = \Lambda^{-1}$, т. е. вектор \mathbf{r} переходит в вектор \mathbf{r}' :

$$\mathbf{r}' = \Lambda \mathbf{r}.$$

Легко показать, что оператор поворота, определённый для бесспиновой частицы как

$$\hat{R}_{\boldsymbol{\theta}} \psi(\mathbf{r}) \equiv \psi(\Lambda^{-1} \mathbf{r}),$$

соответствует повороту системы координат на угол $\boldsymbol{\theta}$ или повороту частицы на угол $(-\boldsymbol{\theta})$ и связан с оператором момента импульса $\hat{\mathbf{M}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}$ соотношением⁴

$$\hat{R}_{\boldsymbol{\theta}} = e^{i\boldsymbol{\theta} \hat{\mathbf{M}}/\hbar}.$$

Собственная функция оператора

$$\hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

имеет вид

$$\psi_k(z) = \frac{e^{ikz}}{\sqrt{2\pi}}$$

⁴Аналогично предыдущему случаю для оператора поворота имеют место равенства

$$\psi'(\mathbf{r}') = \hat{R}_{\boldsymbol{\theta}} \psi(\mathbf{r}') = \psi(\Lambda^{-1} \mathbf{r}') = \psi(\mathbf{r}), \quad \hat{R}_{\boldsymbol{\theta}}^{-1} \mathbf{r} \hat{R}_{\boldsymbol{\theta}} = \Lambda \mathbf{r}.$$

и соответствует собственному значению $\hbar k$. Аналогично собственная функция оператора

$$\hat{M}_z = \hat{p}_{\varphi} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

где φ — азимутальный угол в сферических координатах, имеет вид

$$\Phi_m(\varphi) = A e^{im\varphi}$$

и соответствует собственному значению $\hbar m$. На этом однако аналогия между сдвигом и поворотом кончается.

Собственная функция оператора \hat{p}_z определена на всей прямой,

$$-\infty < z < +\infty,$$

спектр оператора импульса непрерывный, а его собственные функции нормированы на δ -функцию:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_k(z)^* \psi_{k'}(z) dz = \delta(k - k').$$

Собственная функция оператора \hat{M}_z определена в ограниченной области,

$$0 \leq \varphi \leq 2\pi,$$

требование однозначности

$$\Phi_m(\varphi + 2\pi) = \Phi_m(\varphi)$$

приводит к дискретному спектру

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Ортонормированная система собственных функций оператора \hat{M}_z такова:

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad \int_0^{2\pi} \Phi_{m'}^*(\varphi) \Phi_m(\varphi) d\varphi = \delta_{mm'}. \quad (23.1)$$

Далее различные компоненты оператора импульса коммутируют друг с другом, плоская волна

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{(2\pi)^{3/2}}$$

представляет собой совместную собственную функцию операторов \hat{p}_x , \hat{p}_y и \hat{p}_z . Напротив, различные компоненты оператора момента импульса не коммутируют друг с другом. Введем безразмерный оператор

$$\hat{\mathbf{I}} \equiv \frac{\hat{\mathbf{M}}}{\hbar} = -i\mathbf{r} \times \nabla.$$

Нетрудно показать, что

$$[\hat{l}_j, \hat{l}_k] = i\varepsilon_{jkn}\hat{l}_n, \quad [\hat{l}_j, \hat{\mathbf{I}}^2] = 0. \quad (23.2)$$

Отсюда видно, что можно искать совместные собственные функции операторов \hat{l}_x и $\hat{\mathbf{I}}^2$, или \hat{l}_y и $\hat{\mathbf{I}}^2$, или \hat{l}_z и $\hat{\mathbf{I}}^2$, обычно выбирают последний вариант:

$$\hat{\mathbf{I}}^2 \psi_{\lambda m} = \lambda \psi_{\lambda m}, \quad \hat{l}_z \psi_{\lambda m} = m \psi_{\lambda m}. \quad (23.3)$$

23.2. Свойства собственных функций и собственных значений операторов \hat{l}_z и $\hat{\mathbf{I}}^2$, следующие из коммутационных соотношений

Определим операторы \hat{l}_+ и \hat{l}_- соотношением

$$\hat{l}_{\pm} = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y,$$

при этом $(\hat{l}_+)^+ = \hat{l}_-$. Нетрудно показать, что

$$\hat{l}_z \hat{l}_{\pm} = \hat{l}_{\pm} (\hat{l}_z \pm 1), \quad (23.4)$$

$$[\hat{l}_{\pm}, \hat{\mathbf{I}}^2] = 0, \quad (23.5)$$

$$\hat{\mathbf{I}}^2 = \hat{l}_+ \hat{l}_- + \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z = \hat{l}_- \hat{l}_+ + \hat{l}_z^2 + \hat{l}_z. \quad (23.6)$$

Соотношения (4) между оператором \hat{l}_z и операторами \hat{l}_+ и \hat{l}_- аналогичны соотношениям (7.1) между оператором Гамильтона \hat{H} и повышающим \hat{a}^+ и понижающим \hat{a} операторами для линейного осциллятора. Поэтому операторы \hat{l}_+ и \hat{l}_- играют роль повышающих и понижающих операторов для состояний с определённым значением \hat{l}_z . Действительно, из (4)–(5) следует

$$\hat{\mathbf{I}}^2 \hat{l}_{\pm} \psi_{\lambda m} = \lambda \hat{l}_{\pm} \psi_{\lambda m}, \quad \hat{l}_z \hat{l}_{\pm} \psi_{\lambda m} = (m \pm 1) \hat{l}_{\pm} \psi_{\lambda m},$$

т. е.

$$\hat{l}_{\pm} \psi_{\lambda m} = C_{\lambda m} \psi_{\lambda m \pm 1}. \quad (23.7)$$

Поскольку $\langle l_z^2 \rangle \leq \langle \mathbf{I}^2 \rangle$, то при заданном λ существует максимальное значение m , обозначим его $m_{\max} \equiv l$, и минимальное значение $m_{\min} = -l$. Ясно, что

$$\hat{l}_+ \psi_{\lambda l} = 0,$$

отсюда с учетом (6) получаем:

$$\hat{l}_- \hat{l}_+ \psi_{\lambda l} = (\hat{\mathbf{I}}^2 - \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z) \psi_{\lambda l} = (\lambda - l^2 - l) \psi_{\lambda l} = 0,$$

или

$$\lambda = l(l + 1).$$

Применяя n раз понижающий оператор \hat{l}_- к состоянию с наибольшим $m_{\max} = l$, мы получим:

$$(\hat{l}_-)^n \psi_{\lambda l} \propto \psi_{\lambda l-n}.$$

Увеличивая n , мы придем к наименьшему значению $m_{\min} = -l$, в этом случае $l - n = -l$, т. е.

$$2l \text{ — целое число.} \quad (23.8)$$

Отсюда следует, что l может принимать либо целые значения (этот вывод мы уже получили ранее из требования однозначности функции $\Phi_m(\varphi)$), либо полуцелые значения (этот вариант мы рассмотрим в § 36, посвященном частицам со спином $1/2$).

Найдем матричные элементы операторов \hat{l}_{\pm} . Будем обозначать состояние $\psi_{\lambda m}$ с $\lambda = l(l+1)$ как $|lm\rangle$ и усредним (6) по этому состоянию, тогда

$$\begin{aligned} l(l+1) &= \langle lm | \hat{l}_+ \hat{l}_- | lm \rangle + m^2 - m = \\ &= \langle lm | \hat{l}_+ | lm-1 \rangle \langle lm-1 | \hat{l}_- | lm \rangle + m^2 - m, \end{aligned}$$

т. е.

$$|\langle lm | \hat{l}_+ | lm-1 \rangle|^2 = l^2 + l - m^2 + m.$$

Отсюда следует, что

$$\langle lm | \hat{l}_+ | lm-1 \rangle = \langle lm-1 | \hat{l}_- | lm \rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}. \quad (23.9)$$

Извлекая квадратный корень, мы выбрали определённый (положительный) знак, что соответствует фиксированию фазовых соотношений между различными состояниями $|lm\rangle$ с данным l .

Полученные формулы определяют также и коэффициенты C в соотношении (7):

$$\begin{aligned} \hat{l}_+ |lm\rangle &= \sqrt{(l+m+1)(l-m)} |lm+1\rangle, \\ \hat{l}_- |lm\rangle &= \sqrt{(l+m)(l-m+1)} |lm-1\rangle. \end{aligned} \quad (23.10)$$

Зная матричные элементы \hat{l}_{\pm} , легко найти и отличные от нуля матричные элементы \hat{l}_j :

$$\begin{aligned} \langle lm | \hat{l}_x | lm-1 \rangle &= \langle lm-1 | \hat{l}_x | lm \rangle = \frac{1}{2} \sqrt{(l+m)(l-m+1)}, \\ \langle lm | \hat{l}_y | lm-1 \rangle &= -\langle lm-1 | \hat{l}_y | lm \rangle = -\frac{i}{2} \sqrt{(l+m)(l-m+1)}, \\ \langle lm | \hat{l}_z | lm \rangle &= m. \end{aligned} \quad (23.11)$$

В заключение этого раздела укажем некоторое обобщение коммутационных соотношений (2). Пусть \hat{S} — скалярный оператор, построенный из операторов вида \mathbf{r}^2 , $\hat{\mathbf{p}}^2$, $\mathbf{r}\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\mathbf{r}$, т. е.

$$\hat{S} = \hat{S}(\mathbf{r}^2, \hat{\mathbf{p}}^2, \mathbf{r}\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\mathbf{r}).$$

Соответствующая такому оператору физическая величина не изменяется при повороте, поэтому он коммутирует с оператором момента импульса

$$[\hat{l}_j, \hat{S}] = 0.$$

Рассмотрим теперь векторный оператор вида

$$\hat{\mathbf{V}} = \mathbf{r} \hat{S}_1 + \hat{\mathbf{p}} \hat{S}_2 + \hat{\mathbf{M}} \hat{S}_3, \quad \hat{S}_j \equiv \hat{S}_j(\mathbf{r}^2, \hat{\mathbf{p}}^2, \mathbf{r}\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\mathbf{r}).$$

Нетрудно проверить, что для него справедливы коммутационные соотношения, аналогичные соотношениям (2):

$$[\hat{l}_j, \hat{V}_k] = i\varepsilon_{jkn} \hat{V}_n, \quad [\hat{l}_j, \hat{\mathbf{V}}^2] = 0. \quad (23.12)$$

При повороте на угол $\theta \mathbf{n}$ векторный оператор преобразуется по тому же закону, что и координаты, т. е.

$$\hat{R}_{\theta}^{-1} \hat{\mathbf{V}} \hat{R}_{\theta} = \Lambda \hat{\mathbf{V}}, \quad (23.13)$$

где оператор поворота

$$\hat{R}_{\theta} = e^{i\theta \mathbf{n} \hat{l}},$$

а Λ — матрица поворота, соответствующая преобразованию координат $\mathbf{r}' = \Lambda \mathbf{r}$.

23.3. Сферические функции

Для получения конкретного вида собственных функций удобно использовать сферические координаты, в которых

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \hat{l}_{\pm} = e^{\pm i\varphi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right),$$

$$\hat{l}^2 = - \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right].$$

Совместные собственные функции операторов $\hat{\mathbf{I}}^2$ и \hat{l}_z удобно искать в виде

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi),$$

где функция $\Phi_m(\varphi)$ определена в (1) с

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l.$$

Для нахождения функции $\Theta_{lm}(\theta)$ можно использовать такой прием. Условие

$$\hat{l}_+ Y_{lm}(\theta, \varphi) = 0$$

приводит к уравнению

$$\left(\frac{d}{d\theta} - l \operatorname{ctg} \theta \right) \Theta_{lm}(\theta) = 0,$$

откуда получаем

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = A_l e^{il\varphi} \sin^l \theta,$$

где множитель A_l определяется из условия нормировки. Последовательно применяя понижающий оператор в соответствии с (10), получим сферические функции:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi},$$

где $P_l^m(x)$ — присоединенные полиномы Лежандра. Сферические функции образуют ортонормированную систему

$$\int Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

Вместо сферических углов θ и φ нередко используют компоненты единичного вектора:

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad n_x = \sin \theta \cos \varphi, \quad n_y = \sin \theta \sin \varphi, \quad n_z = \cos \theta.$$

Сферическая функция $Y_{lm}(\mathbf{n})$ является суммой однородных полиномов по переменным n_i степени l , в частности,

$$Y_{ll}(\theta, \varphi) = A_l e^{il\varphi} \sin^l \theta = A_l (n_x + in_y)^l,$$

$$\sqrt{2l} Y_{l,l-1}(\theta, \varphi) = \hat{l}_- Y_{ll}(\theta, \varphi) = -l A_l (n_x + in_y)^{l-1} n_z, \dots$$

Отражение системы координат $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ в сферических координатах обычно определяют так:

$$r \rightarrow r, \quad \theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi.$$

При этом

$$Y_{lm}(-\mathbf{n}) = (-1)^l Y_{lm}(\mathbf{n}).$$

Примеры:

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} n_z,$$

$$Y_{1\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (n_x \pm in_y).$$

Задачи

23.1. В состоянии частицы, заданном волновой функцией

$$\Phi(\varphi) = A \cos^2 \varphi,$$

найти вероятности различных значений m проекции момента импульса на ось z и $\langle l_z \rangle$. То же для

$$\Phi(\varphi) = A e^{i\varphi} \cos^2 \varphi.$$

23.2. Обсудить вопрос о том, куда направлен вектор $\langle \psi | \hat{\mathbf{I}} | \psi \rangle$ в состояниях

$$\psi = Y_{ll} \quad \text{и} \quad \psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (Y_{l1} + Y_{l-1}).$$

Показать, что в состоянии ψ_m с определённой проекцией момента импульса m на ось z средние значения $\langle l_x \rangle = \langle l_y \rangle = 0$.

23.3. Исследовать качественно угловое распределение плотности вероятности для состояний, описываемых сферическими функциями $Y_{l,m=l}$ и $Y_{l,m=0}$, считая $l \gg 1$.

23.4. Указать, при каких m и m' могут быть отличны от нуля матричные элементы дипольного $\langle m' | x_i | m \rangle$ и квадрупольного $\langle m' | x_i x_j - \frac{1}{3} \delta_{ij} \mathbf{r}^2 | m \rangle$ моментов.

23.5. Частица находится в состоянии с моментом импульса $l = 1$ и его проекцией m ($m = 0, \pm 1$) на ось z . Найти вероятности $W(m', m)$ различных значений проекции момента импульса m' на ось z' , составляющую угол α с осью z . Рассмотреть, в частности, случай, когда ось z' перпендикулярна оси z .

23.6. Найти $\tilde{Y}_{lm}(\theta, \varphi)$ — собственные функции операторов $\hat{\mathbf{I}}^2$ и \hat{l}_x для $l = 1$.

§ 24. Движение в центральном поле

24.1. Уравнение для радиальной функции

Для центрального поля удобны сферические координаты, в которых уравнение Шредингера имеет вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \hat{\mathbf{I}}^2}{2mr^2} + U(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi).$$

Его можно легко получить, используя тождество

$$\frac{\hbar^2 \hat{\mathbf{I}}^2}{r^2} = -[\hat{\mathbf{p}} \times \mathbf{r}] \frac{1}{r^2} [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] = \hat{\mathbf{p}}^2 - (\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{r}) \frac{1}{r^2} (\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{p}}).$$

Разделяя переменные

$$\psi = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi),$$

получим для радиальной функции уравнение

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + U_{\text{эф}}(r) \right] R_l(r) = E_l R_l(r),$$

в котором

$$U_{\text{эф}} = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}.$$

От первой производной по r можно избавиться заменой

$$R_l(r) = \frac{\chi_l(r)}{r}.$$

Для $\chi_l(r)$ получаем обычное одномерное уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \chi_l''(r) + U_{\text{эф}}(r) \chi_l(r) = E_l \chi_l(r),$$

но с эффективным потенциалом $U_{\text{эф}}(r)$, зависящим от l . Условие нормировки для функции $\chi_l(r)$ в случае финитного движения таково:

$$\int_0^\infty |\chi_l(r)|^2 dr = 1.$$

Если функция $U(r)$ всюду конечна, а при $r \rightarrow 0$ обращается в бесконечность, но так что $r^2 U(r) \rightarrow 0$, то волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ должна быть конечной во всем пространстве (см. [1] § 35). Отсюда следует, что в этом случае

$$\chi_l(r) \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow 0. \quad (24.1)$$

Терминология:

$l = 0, 1, 2, 3, \dots$ (s, p, d, f, \dots) — азимутальное квантовое число,

$m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$ — магнитное квантовое число.

Радиальное квантовое число n_r равняется числу нулей функции $\chi_l(r)$ (кроме точек $r = 0$ и $r = \infty$).

Поведение при $r \rightarrow 0$.

Пусть $r^2 U(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$, тогда решениями уравнения

$$\chi_l''(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} \chi_l(r)$$

служат функции

$$\chi_l(r) = ar^{l+1} \quad \text{и} \quad \chi_l(r) = \frac{b}{r^l}. \quad (24.2)$$

Второе решение не удовлетворяет условию (1) и потому не годится.

Таким образом, при любых l

$$\chi_l(0) = 0.$$

Соответственно

$$\psi(0) \neq 0 \quad \text{лишь для} \quad l = 0 \quad (s\text{-состояния}).$$

Заметим, что вывод квазиклассического приближения для радиального уравнения Шредингера требует некоторой аккуратности, так как при малых значениях r эффективная потенциальная энергия сингулярна, $U_{\text{эф}}(r) \approx \hbar^2 l(l+1)/(2mr^2)$. Результат такого рассмотрения (см. задачу 2 из § 5 в [3]) сводится к простой замене

$$l(l+1) \rightarrow (l+1/2)^2$$

в эффективной потенциальной энергии. Эта замена заведомо допустима для квазиклассических орбитальных моментов, т. е. при $l \gg 1$. А кроме того, при любых l она обеспечивает правильное поведение радиальной волновой функции на малых расстояниях, если центробежный член доминирует при $r \rightarrow 0$. Действительно, как нетрудно убедиться, именно при такой замене квазиклассическое выражение для радиальной волновой

функции

$$\chi(r) = \frac{C}{\sqrt{\varkappa(r)}} e^{\pm \int_{r_0}^r \varkappa(r) dr}, \quad \varkappa(r) = \frac{l+1/2}{r}$$

правильно воспроизводит асимптотику (2).

Поведение при $r \rightarrow \infty$

Считая, что поле убывает достаточно быстро, получим

$$\chi_l''(r) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \chi_l(r),$$

так что

$$\chi_l(r) = \begin{cases} A e^{\pm ikr} & \text{или} \quad B \sin(kr + \alpha_l) & \text{при} \quad E > 0, \\ C e^{-\varkappa r} & & \text{при} \quad E < 0, \end{cases}$$

где $\hbar k = \sqrt{2mE}$, а $\hbar \varkappa = \sqrt{-2mE}$.

24.2. Свободное движение

При $l = 0$ решением уравнения

$$\chi''(r) + k^2 \chi(r) = 0$$

с граничным условием $\chi(0) = 0$ служит функция

$$\chi_{k0}(r) = A \sin kr.$$

Определим коэффициент A , используя нормировку на δ -функцию “по шкале k' ”:

$$\begin{aligned} \delta(k - k') &= \int_0^\infty \chi_{k'0}(r) \chi_{k0}(r) dr = \\ &= -\frac{|A|^2}{4} \int_0^\infty \left[e^{i(k+k')r} + e^{-i(k+k')r} - (k \rightarrow -k) \right] dr = \\ &= -\frac{|A|^2}{4} \int_{-\infty}^\infty e^{i(k+k')r} dr + (k \rightarrow -k) = \\ &= -\frac{|A|^2}{4} [2\pi \delta(k + k') - 2\pi \delta(k - k')]; \end{aligned}$$

отсюда следует

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

В итоге

$$\chi_{k0}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin kr.$$

Можно показать (см. [1], § 33), что при $l > 0$

$$\chi_{kl}(r) = \frac{r^{l+1}}{k^l} \left(-\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{\chi_{k0}(r)}{r} = \sqrt{kr} J_{l+1/2}(kr);$$

отсюда

$$\chi_{kl}(r) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \begin{cases} \frac{(kr)^{l+1}}{(2l+1)!!} & \text{при } r \rightarrow 0, \\ \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right) & \text{при } r \rightarrow \infty. \end{cases}$$

Если поле убывает при $r \rightarrow \infty$ достаточно быстро, то при $E > 0$ и больших r движение становится свободным, поэтому

$$\chi_{kl}(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right),$$

при этом все отличие от случая свободного движения заключено в величинах δ_l , которые называются *фазами рассеяния* (они имеют важное значение в теории рассеяния (см. § 34)).

Задачи

24.1. Определить уровни энергии для движения частицы с моментом $l = 0$ в сферической прямоугольной потенциальной яме:

$$U(r) = \begin{cases} -V & \text{при } r < a \\ 0 & \text{при } r > a. \end{cases}$$

Показать, что эта задача сводится к задаче 4.1.

24.2. Определить последовательность, в которой появляются уровни с различными l по мере возрастания глубины ямы V .

24.3. Как меняются значения $E_{n_r, l}$ энергетических уровней частицы в дискретном спектре:

- а) при фиксированном значении l с увеличением n_r ;
- б) при фиксированном значении n_r с увеличением l ?

24.4. Найти уровни энергии и нормированные волновые функции стационарных состояний сферического осциллятора $U(r) = \frac{1}{2}kr^2$, используя декартовы координаты. Определить кратность вырождения уровней.

Произвести классификацию четырех нижних уровней осциллятора по n_r , l и чётности, исходя только из известного значения кратности вырождения уровней.

Какая комбинация волновых функций $\psi_{n_1 n_2 n_3}$ отвечает состоянию осциллятора с моментом $l = 0$ (при $N = n_1 + n_2 + n_3 = 2$)?

24.5. Несвязанный электрон создает в жидком гелии вокруг себя пузырьки. Найти радиус пузырька, предполагая, что его сферическая поверхность служит непроницаемым потенциальным барьером для электрона. Коэффициент поверхностного натяжения жидкого гелия $\alpha = 0,36 \cdot 10^{-7}$ Дж·см⁻².

§ 25. Атом водорода

Задача сводится к движению в поле

$$U = -\frac{e^2}{r}$$

частицы с приведенной массой

$$m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e;$$

ниже рассматривается только случай $E < 0$ (связанные состояния) и используется обозначение

$$\kappa = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}.$$

Атомная система единиц

Естественная система единиц для задачи об атоме водорода включает \hbar , e , m . Из них строятся единицы длины (боровской радиус):

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ см},$$

энергии (удвоенный Ридберг):

$$E_{\text{ат}} = \frac{me^4}{\hbar^2} = 27,2 \text{ эВ} = 2 \text{ Ry},$$

времени:

$$t_{\text{ат}} = \frac{\hbar^3}{me^4} = 2,4 \cdot 10^{-17} \text{ с},$$

скорости:

$$v_{\text{ат}} = \frac{e^2}{\hbar} = \alpha c,$$

где

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

— так называемая постоянная тонкой структуры. (Найдите единицы импульса, силы, напряженности электрического и магнитного полей.)

Решение радиального уравнения

Переходя к безразмерным величинам

$$r' = \frac{r}{a_B}, \quad E' = \frac{E}{E_{\text{ат}}},$$

получим уравнение Шредингера в виде

$$\frac{d^2 \chi_l(r)}{dr'^2} + \left[2E' + \frac{2}{r'} - \frac{l(l+1)}{r'^2} \right] \chi_l(r) = 0.$$

В дальнейшем штрихи опускаем.

Мы знаем, что $\chi_l(r) \sim r^{l+1}$ при $r \rightarrow 0$ и $\chi_l(r) \sim e^{-\kappa r}$ при $r \rightarrow \infty$. Поэтому ищем решение в виде

$$\chi_l(r) = r^{l+1} e^{-\kappa r} w(r).$$

Для $w(r)$ получаем уравнение

$$r w''(r) + 2(l+1 - \kappa r) w'(r) + 2(1 - \kappa - \kappa l) w(r) = 0.$$

Его решение ищем в виде ряда

$$w(r) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s r^s.$$

Рекуррентное соотношение для коэффициентов таково:

$$a_{s+1} = 2 \frac{\kappa(s+l+1) - 1}{(s+1)(s+2l+2)} a_s. \quad (25.1)$$

Из него получаем

$$a_{s+1} \rightarrow \frac{2\kappa}{s+1} a_s \quad \text{при } s \rightarrow \infty.$$

Таким образом,

$$a_s \approx \frac{(2\kappa)^s}{s!} \quad \text{при } s \gg 1$$

и функция $w(r)$ при $r \rightarrow \infty$ асимптотически совпадает с функцией

$$\sum_{s=0}^{\infty} \frac{(2\kappa)^s}{s!} = e^{2\kappa r}.$$

Чтобы $\chi_l(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, необходимо оборвать ряд на некотором $s = n_r$. При этом

$$\varkappa(n_r + l + 1) - 1 = 0, \quad \varkappa = \frac{1}{n_r + l + 1}$$

и функция

$$w(r) = L_{n_r}(r)$$

— полином степени n_r , имеющий n_r нулей (он сводится к полиному Лагерра). В итоге,

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}; \quad \psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi); \quad R_{nl}(r) = r^l e^{-r/n} L_{n_r}(r);$$

$$n = n_r + l + 1 = 1, 2, 3, \dots;$$

$$n_r = 0, 1, 2, \dots, n - 1; \quad l = 0, 1, 2, \dots, n - 1.$$

В обычных единицах

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}.$$

Заметим, что степени \hbar и n здесь совпадают, в полном соответствии с общими соображениями.

Кулоновское вырождение

Уровню E_n с данным главным квантовым числом n соответствует

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2$$

различных состояний (различных волновых функций). Чётность состояния ψ_{nlm} равна $(-1)^l$. Основному уровню E_1 соответствует единственное чётное состояние ψ_{100} , а у всех возбужденных уровней имеются состояния различной чётности.

Состояния с $l = n - 1$

Для них $n_r = 0$ и $L_{n_r}(r)$ — просто константа, которую легко определить из условия нормировки, используя известный интеграл

$$\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}.$$

Таким образом, получим

$$R_{n,n-1}(r) = r^{n-1} e^{-r/n} \sqrt{\frac{1}{(2n)!} \left(\frac{2}{n}\right)^{2n+1}}. \quad (25.2)$$

Отсюда найдем, что в данном состоянии средний радиус

$$\langle r \rangle = n \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

а относительная дисперсия радиуса равна

$$\frac{\Delta r}{\langle r \rangle} = \frac{1}{\sqrt{2n+1}}.$$

Основное состояние

У основного $1s$ состояния энергия и волновая функция

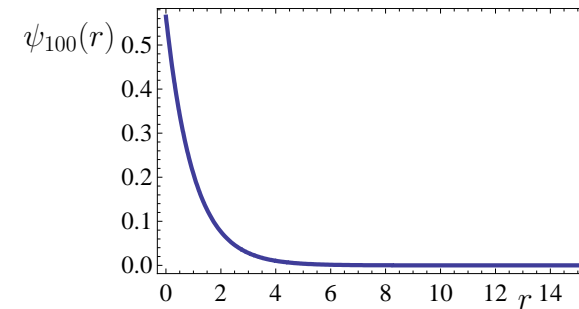
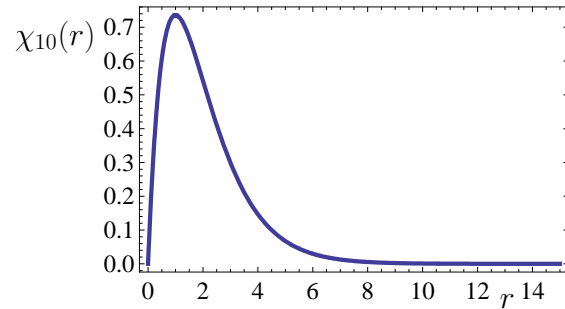


Рис. 18. График функции $\psi_{100}(r)$ (в атомной системе единиц)

Рис. 19. График функции $\chi_{10}(r)$ (в атомной системе единиц)

(в обычных единицах) таковы (рис. 18, 19):

$$E_1 = -\frac{E_{\text{ат}}}{2} = -13,6 \text{ эВ}, \quad \psi_{100}(\mathbf{r}) = \frac{e^{r/a_B}}{\sqrt{\pi a_B^3}}.$$

В этом состоянии момент импульса равен нулю: $\mathbf{M} = 0$, и

$$\langle r \rangle = \frac{3}{2}, \quad \frac{\Delta r}{\langle r \rangle} = \frac{1}{\sqrt{3}} \approx 60 \%.$$

Таким образом, здесь нет никакого сходства с моделью Бора, в которой электрон имеет момент импульса $M = \hbar$ и вращается по окружности боровского радиуса:

$$\langle r \rangle = 1, \quad \Delta r = 0.$$

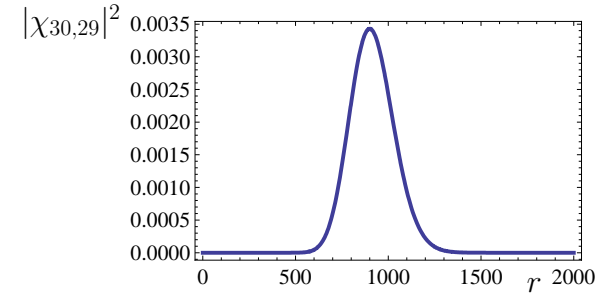
Состояние с $l = m = n - 1 \gg 1$

При $l = m = n - 1 \gg 1$, напротив, квантовая механика даёт ответ, близкий к боровской модели. А именно, средний радиус велик:

$$\langle r \rangle \approx n^2,$$

относительная дисперсия радиуса мала (рис. 20):

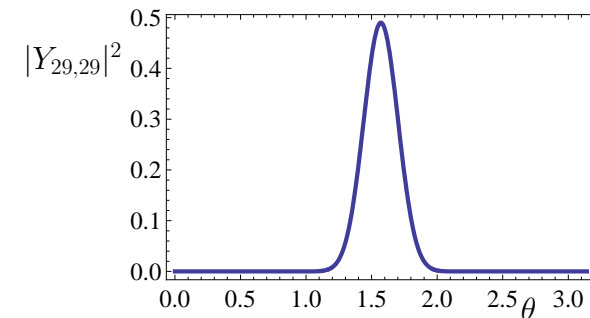
$$\frac{\Delta r}{\langle r \rangle} \approx \frac{1}{\sqrt{2n}},$$

Рис. 20. График функции $|\chi_{30,29}(r)|^2$ (в атомной системе единиц)

в угловом распределении

$$|Y_{n-1,n-1}(\theta, \varphi)|^2 \propto \sin^{2n-2} \theta$$

вероятность найти электрон не зависит от азимутального угла φ и сконцентрирована в узком интервале полярных углов $\Delta\theta \approx 1/\sqrt{2n}$ вблизи $\theta = \pi/2$ (рис. 21), что очень похоже на

Рис. 21. График функции $|Y_{29,29}(\theta, \varphi)|^2$

классическую траекторию — окружность радиуса n^2 в плоскости xy .

Первый возбужденный уровень $n = 2$

Радиальная волновая функция состояния $2p$ с $l = 1$ (см. (2) и рис. 22)

$$R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{24}} r e^{-r/2}$$

не имеет нулей при конечных $r \neq 0$. Для $2s$ состояния рекур-

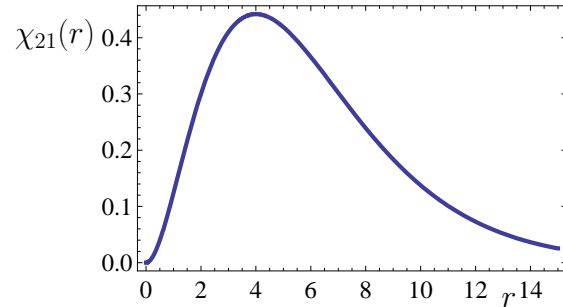


Рис. 22. График функции $\chi_{21}(r)$ (в атомной системе единиц)

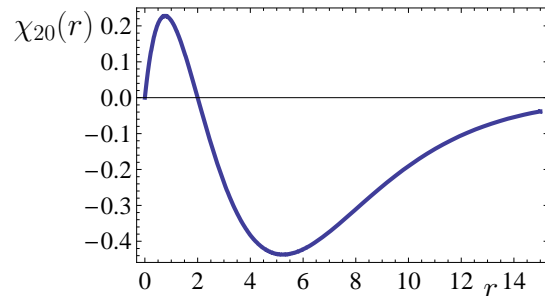


Рис. 23. График функции $\chi_{20}(r)$ (в атомной системе единиц)

рентное соотношение (1) дает $a_1 = -\frac{1}{2}a_0$, а из условия нормировки получаем $a_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, итого (рис. 23):

$$R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 - \frac{1}{2}r\right) e^{-r/2};$$

эта функция обращается в нуль при $r = 2$.

Спектральные серии

Фотон, испущенный при переходе атома водорода из начального уровня E_{n_i} на конечный уровень E_{n_f} , имеет энергию

$$\hbar\omega_{fi} = E_{n_i} - E_{n_f} = \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) R_y, \quad n_i > n_f.$$

При $n_f = 1$ возникает серия *Лаймана* в ультрафиолетовой области спектра; при $n_f = 2$ — серия *Бальмера*, причем четыре линии $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, H_\delta$, соответствующие $n_i = 3, 4, 5, 6$, лежат в видимой области спектра; при $n_f \geq 3$ возникают серии в инфракрасной области спектра.

Водородоподобные атомы (см. задачу 25.8).

Малые поправки к формуле Бора для E_n обсуждаются в § 51 (тонкая структура с интервалами $\sim \alpha^2 E_{\text{ат}}$) и в § 61 (сверхтонкая структура с интервалами $\sim \alpha^2 (m_e/m_p) E_{\text{ат}}$).

Задачи

25.1. Для состояния $1s$ атома водорода дать графики dW/d^3r и dW/dr в зависимости от r . Найти $\varphi_{100}(p)$ и дать графики dW/d^3p и dW/dp в зависимости от p . Найти $\langle \mathbf{p} \rangle$, оценить $\langle p \rangle$ и Δp .

25.2. Найти радиальную функцию $R_{20}(r)$ из условия ее ортогональности к функции $R_{10}(r)$. Ортогональны ли радиальные функции $R_{20}(r)$ и $R_{21}(r)$?

25.3. Задача 2 из [1], § 36. Оценить напряженность электрического поля атома водорода на расстоянии $r = a_B$.

25.4. Для $2s$ и $2p$ состояний атома водорода дать графики dW/d^3r в зависимости от r и θ . Определить среднее магнитное поле, создаваемое электроном в центре атома водорода в состоянии $2p$.

25.5. Для того, чтобы учесть отсутствие случайного кулоновского вырождения по l в спектрах водородоподобных атомов, можно попытаться использовать потенциальную энергию вида

$$U(r) = -\frac{Z_a e^2}{r} - \beta r_0 \frac{Z_a e^2}{r^2}, \quad r_0 = \frac{\hbar^2}{m Z_a e^2},$$

где второй член моделирует поляризуемость атомного остатка под действием валентного электрона. Найти уровни энергии в этом потенциальном поле.

25.6. Найти вероятность того, что при β -распаде трития электрон останется в основном состоянии иона He^+ .

25.7. У волновой функции $\psi = A\psi_{200} + B\psi_{210}$ определить коэффициенты A и B , дающие наибольшее среднее значение дипольного момента $\langle \psi | e\mathbf{r} | \psi \rangle = \mathbf{d}$, и найти величину \mathbf{d} .

25.8. Оценить размеры и уровни энергии водородоподобных атомов He^+ , Li^{++} , e^+e^- (позитроний), μ^-p (мюоний), $\mu^-\mu^+$ (димюоний), $\mu^-\pi^+$, μ^- в поле ядра свинца Pb^{+82} . Масса мюона $m_\mu \approx 200 m_e$, масса пиона $m_\pi \approx 270 m_e$.

25.9* Можно ли считать квазиклассической волновую функцию (2) состояния с $l = n - 1$, $n_r = 0$ при $n \gg 1$?

25.10. Найти спектр электрона над поверхностью жидкого гелия. Диэлектрическая постоянная жидкого гелия $\varepsilon = 1,057$.

Глава IV

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

§ 26. Стационарная теория возмущений. Невырожденный случай

Пусть некий гамильтониан \hat{H} можно представить в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

где для невозмущённого гамильтониана \hat{H}_0 известны его собственные функции и собственные значения, $\psi_n^0(x)$ и E_n^0 :

$$\hat{H}_0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0,$$

а \hat{V} — малое возмущение. Рассмотрим, как под действием этого возмущения сдвигается n -й невырожденный уровень E_n^0 и как изменяется волновая функция $\psi_n^0(x)$.

Точное решение уравнения $\hat{H}\psi = E\psi$ разложим по невозмущённым волновым функциям и подставим

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m^0$$

в исходное уравнение

$$(\hat{H}_0 + \hat{V})\psi = E\psi.$$

Домножим это уравнение слева на $(\psi_k^0)^*$ и проинтегрируем по x , тогда получим систему алгебраических уравнений:

$$(E - E_k^0) c_k = \sum_m V_{km} c_m, \quad V_{km} = \langle \psi_k^0 | \hat{V} | \psi_m^0 \rangle. \quad (26.1)$$

Разложим точные решения E и ψ в ряд по малому возмущению

$$E = E_n^0 + E_n^1 + E_n^2 + \dots, \quad c_m = c_m^0 + c_m^1 + \dots$$

Так как $\psi \rightarrow \psi_n^0$ при $\hat{V} \rightarrow 0$, то $c_m^0 = 1$ при $m = n$ и $c_m^0 = 0$ при $m \neq n$, т. е. $c_m^0 = \delta_{mn}$. Более того, из условия нормировки

$$\int |\psi|^2 dx = 1$$

имеем, удерживая лишь члены до первого порядка включительно,

$$|1 + c_n^1 + \dots|^2 + \sum_{m \neq n} |c_m^1 + \dots|^2 = 1 + 2 \operatorname{Re} c_n^1 + \dots = 1,$$

откуда следует, что c_n^1 — чисто мнимый коэффициент, $c_n^1 = i\beta$.

Но тогда для волновой функции с той же точностью можем записать:

$$\psi = (1 + i\beta) \psi_n^0 + \sum_{m \neq n} c_m^1 \psi_m^0 \approx e^{i\beta} \left(\psi_n^0 + \sum_{m \neq n} c_m^1 \psi_m^0 \right).$$

Иными словами, учет величины β приводит лишь к несущественному фазовому множителю. Поэтому, полагая $\beta = 0$, имеем в итоге

$$c_m = \begin{cases} 1 + c_n^2 + \dots & \text{при } m = n \\ c_m^1 + \dots & \text{при } m \neq n. \end{cases}$$

Таким образом, из (1) получаем

$$\begin{aligned} (E_n^0 - E_k^0 + E_n^1 + E_n^2 + \dots) (\delta_{kn} + c_k^1 + \dots) = \\ = V_{kn} + \sum_{m \neq n} V_{km} (c_m^1 + \dots). \end{aligned}$$

В **первом** порядке при $k = n$ отсюда следует $E_n^1 = V_{nn}$, а при $k \neq n$ получаем

$$(E_n^0 - E_k^0) c_k^1 = V_{kn},$$

откуда

$$c_k^1 = \frac{V_{kn}}{E_n^0 - E_k^0} \quad \text{при } k \neq n.$$

Итак,

$$E_n^1 = V_{nn} = \langle \psi_n^0 | \hat{V} | \psi_n^0 \rangle, \quad \psi = \psi_n^0 + \sum_{m \neq n} \psi_m^0 \frac{V_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}.$$

Критерий применимости: ψ должна мало отличаться от ψ_n^0 , т. е.

$$|V_{mn}| \ll |E_m^0 - E_n^0|.$$

Во **втором** порядке при $k = n$ получаем

$$E_n^2 = \sum_m V_{nm} c_m^1 = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^0 - E_m^0}.$$

Отметим, что если поправка второго порядка к основному уровню E_0 отлична от нуля, то она отрицательна,

$$E_0^2 \leq 0.$$

Задачи

26.1. Определить поправки к основному состоянию линейного осциллятора за счет малых ангармонических поправок $V = \alpha x^3 + \beta x^4$. Учесть члены первого порядка по β и второго по α .

26.2. Вычислить поправку первого порядка к энергии основного состояния водородоподобного атома, обусловленную неточностью ядра. Ядро считать:

а) сферой радиуса R , по поверхности которой равномерно распределен заряд;

б) шаром радиуса R с равномерно распределенным по объему зарядом.

Оценить поправку для атома водорода, считая $R \sim 10^{-13}$ см.

Как изменится результат для состояния $2p$?

26.3. Оценить величины поправок к кулоновским уровням энергии водорода, обусловленных:

а) релятивистскими поправками к кинетической энергии электрона;

б) взаимодействием с магнитным моментом ядра (сверхтонкая структура);

в) наличием у ядра электрического квадрупольного момента (так называемая квадрупольная сверхтонкая структура).

§ 27. Производная от энергии по параметру

Пусть невозмущенный гамильтониан зависит от параметра λ , т. е. $\hat{H}_0 = \hat{H}(\lambda)$, а

$$\hat{H} = \hat{H}(\lambda + \Delta\lambda) = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

где возмущение

$$\hat{V} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \Delta\lambda.$$

В первом порядке теории возмущений поправка к энергии равна

$$E_n^1 = \left\langle n \left| \left(\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right) \Delta\lambda \right| n \right\rangle.$$

С другой стороны, $E_n^1 = (\partial E_n / \partial \lambda) \Delta\lambda$, поэтому

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle n \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right| n \right\rangle.$$

§ 27. Производная от энергии по параметру

В частности, для центрального поля при $\lambda \equiv l$ имеем

$$\hat{H}(l) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r),$$

и поэтому

$$\frac{\partial E_{nr,l}}{\partial l} = \left\langle n_r l \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial l} \right| n_r l \right\rangle = \left\langle n_r l \left| \frac{\hbar^2(2l+1)}{2mr^2} \right| n_r l \right\rangle.$$

Отсюда видно, что

$$\frac{\partial E_{nr,l}}{\partial l} > 0,$$

т. е. в центральном поле с ростом l (при фиксированном n_r) энергии уровней растут, что вполне согласуется с классическими представлениями.

Для атома водорода

$$E_{nr,l} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(n_r + l + 1)^2},$$

и поэтому

$$\left\langle nl \left| \frac{1}{r^2} \right| nl \right\rangle = \frac{1}{n^3(l + \frac{1}{2})} \frac{1}{a_B^2}. \quad (27.1)$$

Если к кулоновскому полю $U = -e^2/r$ есть малая поправка вида

$$V = \frac{\beta}{r^2},$$

то энергия начинает зависеть не только от n , но и от l :

$$E_{nl} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} + \frac{\beta m^2 e^4}{\hbar^4 n^3 (l + \frac{1}{2})}.$$

Обратим внимание на то, что в пределе больших квантовых чисел их полная степень в найденной поправке совпадает со степенью \hbar :

$$\Delta E_{nl} \propto \frac{1}{\hbar^4 n^3 l}.$$

Так и должно быть для любого матричного элемента, имеющего классический предел.

§ 28. Поляризуемость атома

Для атома в слабом однородном электрическом поле \mathcal{E} возмущение

$$\hat{V} = -\mathbf{d}\mathcal{E},$$

где $\mathbf{d} = -e\sum_a \mathbf{r}_a$ — дипольный момент атома (здесь сумма берется по всем электронам атома, \mathbf{r}_a — радиус-вектор a -го электрона и e — элементарный заряд). Если состояние атома ψ_n^0 является невырожденным и обладает определенной чётностью, то среднее значение $\langle \mathbf{d} \rangle = 0$. В этом случае поправка первого порядка $E_n^1 = 0$ и поправка к энергии возникает лишь во втором порядке

$$\Delta E_n = E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | \mathbf{d}\mathcal{E} | n \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \equiv -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \alpha_{ij} \mathcal{E}_i \mathcal{E}_j.$$

Отсюда тензор поляризуемости равен

$$\alpha_{ij} = 2 \sum_{m \neq n} \frac{\langle n | d_i | m \rangle \langle m | d_j | n \rangle}{E_m^0 - E_n^0}.$$

Если состояние атома ψ_n^0 сферически симметрично, то $\alpha_{ij} = \alpha \delta_{ij}$ и

$$\alpha = 2 \sum_{m \neq n} \frac{\langle n | d_z | m \rangle \langle m | d_z | n \rangle}{E_m^0 - E_n^0}.$$

Очевидно, что в основном состоянии атома его поляризуемость $\alpha > 0$.

Оценим величину α для основного состояния атома водорода.

В этом случае все слагаемые в сумме по возбужденным состояниям ψ_m^0 положительны. Для оценки снизу оставим в этой сумме лишь одно слагаемое

$$|m\rangle \rightarrow |nlm\rangle = |210\rangle.$$

Отсюда (в атомной системе единиц)

$$\alpha > 2 \frac{|\langle 100 | z | 210 \rangle|^2}{-\frac{1}{8} + \frac{1}{2}} = \frac{2^{19}}{3^{11}} \approx 2,96.$$

Для оценки сверху заменим знаменатель $E_m^0 - E_1^0$ на независящую от индекса m величину

$$E_m^0 - E_1^0 \rightarrow E_2^0 - E_1^0 = \frac{3}{8} \leq E_m^0 - E_1^0.$$

Тогда

$$\alpha < \frac{16}{3} \sum_m \langle 100 | z | m \rangle \langle m | z | 100 \rangle = \frac{16}{3} \langle 100 | z^2 | 100 \rangle = \frac{16}{3} \approx 5,33.$$

Точное значение

$$\alpha = 4,5 a_B^3$$

(см. [1] задача 4 к § 76).

Задача

28.1*. Найти поляризуемость водородоподобного иона с зарядом ядра Ze .

§ 29. Силы Ван-дер-Ваальса

На больших расстояниях $R \gg a_B$ два нейтральных атома имеют диполь-дипольное взаимодействие

$$V = \frac{\mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2 - 3(\mathbf{d}_1 \mathbf{n})(\mathbf{d}_2 \mathbf{n})}{R^3} = -\frac{2d_{1z}d_{2z} - d_{1x}d_{2x} - d_{1y}d_{2y}}{R^3},$$

где единичный вектор $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$ направлен от первого ядра ко второму вдоль оси z . Рассмотрим случай, когда уровень E_n^0 невырожден и волновая функция ψ_n^0 соответствует состоянию,

в котором распределение электронов у каждого из атомов обладает сферической симметрией. В этом случае средние значения дипольных моментов атомов равны нулю, $\langle \psi_n^0 | \mathbf{d}_1 | \psi_n^0 \rangle = \langle \psi_n^0 | \mathbf{d}_2 | \psi_n^0 \rangle = 0$, и потому поправка первого порядка по этому взаимодействию также равна нулю, $E_n^1 = 0$. Поправка второго порядка к этому уровню имеет вид

$$E_n^2 \equiv U(R) = -\frac{\beta}{R^6},$$

где

$$\beta = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^0 | 2d_{1z}d_{2z} - d_{1x}d_{2x} - d_{1y}d_{2y} | \psi_n^0 \rangle|^2}{E_m^0 - E_n^0}.$$

Если оба атома находятся в основном состоянии, то поправка второго порядка является отрицательной, т. е. $\beta > 0$, и Ван-дер-Ваальсовы силы оказываются силами притяжения.

Рассмотрим подробнее случай взаимодействия двух атомов водорода, находящихся в основном состоянии, для которого

$$E_n^0 \rightarrow E_0 = -E_{\text{ат}}, \quad \psi_n^0 \rightarrow \psi_0 = \psi_{100}(r_1)\psi_{100}(r_2),$$

где

$$\psi_{100}(r) = \frac{e^{-r/a_{\text{В}}}}{\sqrt{\pi a_{\text{В}}^3}}$$

и \mathbf{r}_i — расстояние i -го электрона от своего ядра. В этом случае оператор возмущения имеет вид

$$V = -\frac{e^2}{R^3} (2z_1z_2 - x_1x_2 - y_1y_2). \quad (29.1)$$

Оценки константы β могут быть проведены так же, как и в предыдущем разделе, при этом

$$\frac{2^{33}}{3^{20}} \approx 2,46 < \frac{\beta}{e^2 a_{\text{В}}^5} < 8.$$

Расчёт дает

$$\beta = 6,5 e^2 a_{\text{В}}^5.$$

Интересно разобраться в том, как возникает взаимодействие двух нейтральных сферически симметричных атомов водорода. Для этого рассмотрим структуру первой поправки к волновой функции, которая имеет вид

$$\psi_0^1 = \sum_{m \neq 0} \frac{\langle \psi_m^0 | V | \psi_0 \rangle}{E_0 - E_m^0} \psi_m^0,$$

где функция $V = V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ определена в (1). Волновые функции ψ_m^0 можно выбрать имеющими определённую чётность. Так как V и ψ_0 являются чётными функциями, то матричный элемент $\langle \psi_m^0 | V | \psi_0 \rangle$ отличен от нуля, только если ψ_m^0 является чётной функцией. Таким образом, мы приходим к выводу, что не только волновая функция основного состояния ψ_0 , но и первая поправка к ней, ψ_0^1 , являются чётными функциями. Поэтому

$$\langle \psi_0 + \psi_0^1 | \mathbf{r}_1 | \psi_0 + \psi_0^1 \rangle = \langle \psi_0 + \psi_0^1 | \mathbf{r}_2 | \psi_0 + \psi_0^1 \rangle = 0,$$

т. е. даже с учетом первой поправки в атомах не произошло разделение центров положительных и отрицательных зарядов. Отсюда видно, что притяжение между атомами водорода обусловлено не деформацией электронных оболочек атомов, а корреляцией между положениями электронов. Более вероятны такие положения двух электронов, в которых их дипольные моменты вдоль оси z имеют одинаковый знак, а вдоль осей x и y — противоположный знак, и потому взаимодействие атомов соответствует притяжению.

§ 30. Стационарная теория возмущений при наличии вырождения

30.1. Общие формулы

Пусть невозмущенному уровню E_n^0 соответствуют s различных функций:

$$\varphi_1^0, \varphi_2^0, \dots, \varphi_s^0.$$

Решение уравнения

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) \psi = E \psi$$

ищем в виде

$$\psi = \sum_{m=1}^s c_m \varphi_m^0.$$

Это приводит к системе уравнений

$$(E - E_n^0) c_k = \sum_{m=1}^s V_{km} c_m,$$

где

$$V_{km} = \langle \varphi_k^0 | \hat{V} | \varphi_m^0 \rangle$$

и все c_m , вообще говоря, не малы. Подставляя

$$E = E_n^0 + E_n^1 + \dots,$$

получим в первом порядке систему линейных однородных уравнений для определения c_m :

$$\sum_{m=1}^s (V_{km} - E_n^1 \delta_{km}) c_m = 0, \quad k = 1, 2, \dots, s.$$

Эта система имеет нетривиальное решение, если

$$\det |V_{km} - E_n^1 \delta_{km}| = 0.$$

Это уравнение имеет, вообще говоря, s различных корней $E_n^1(j)$, где $j = 1, 2, \dots, s$, и столько же независимых наборов коэффициентов c_m . Приведём пример.

30.2. Двукратно вырожденный уровень

В этом случае секулярное уравнение

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^1 & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E^1 \end{vmatrix} = 0$$

имеет корни

$$E^1(1, 2) = \frac{1}{2} (V_{11} + V_{22}) \mp \frac{1}{2} \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}.$$

Расщепление уровней равно

$$\Delta E = \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}.$$

Пусть возмущение зависит от некоторого параметра λ . Можно ли, меняя λ , добиться того, чтобы уровни 1 и 2 пересеклись? Обращение $\Delta E(\lambda)$ в нуль возможно лишь при условиях

$$V_{11}(\lambda) = V_{22}(\lambda), \quad V_{12}(\lambda) = 0.$$

Но это, по существу, два уравнения для одной переменной λ , которые, вообще говоря, несовместны. Нельзя совместить два уровня, меняя одну переменную. Это так называемая **теорема о непересечении уровней**. Очевидные исключения — случаи, когда $V_{12}(\lambda)$ или $V_{11}(\lambda) - V_{22}(\lambda)$ обращаются в нуль тождественно.

Задача

30.1. Плоский ротор с моментом инерции I и электрическим дипольным моментом \mathbf{d} помещен в однородное электрическое поле \mathcal{E} , лежащее в плоскости вращения.

а) Рассматривая действие поля как возмущение, найти поляризуемость основного состояния ротора.

б) Найти в первых двух порядках теории возмущений сдвиг и расщепление энергетических уровней возбужденных состояний

ротатора. Указать правильные функции нулевого приближения. Специально обсудить случай первого возбужденного уровня.

в) В каком порядке теории возмущений возникает расщепление n -ого уровня ротатора? Вычислить это расщепление.

§ 31. Эффект Штарка для атома водорода при $n = 2$

У невозмущённого уровня $E_2^0 = -\frac{1}{4} \text{ Ry}$ имеется 4 состояния: $2s$; $2p, m = +1$; $2p, 0$; $2p, -1$. Возмущение $V = ez\mathcal{E}$ сохраняет l_z . Значит, состояния $2p, +1$ и $2p, -1$ не смешиваются ни друг с другом, ни с остальными состояниями. Поэтому для них применима теория возмущений без вырождения, что даёт

$$E_2^1 = \langle 2p, \pm 1 | V | 2p, \pm 1 \rangle = 0.$$

Остаются два состояния $\varphi_1^0 = |2s\rangle$ и $\varphi_2^0 = |2p, 0\rangle$, для них

$$V_{11} = V_{22} = 0, \quad V_{12} = V_{21} = -3ea_B\mathcal{E}.$$

Отсюда получаем два решения:

$$E_2^1 = \mp 3ea_B\mathcal{E}, \quad \psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{200} \pm \psi_{210}).$$

Таким образом, исходный уровень E_2^0 расщепился на три подуровня, из которых нижний $E_2^0 - 3ea_B\mathcal{E}$ и верхний $E_2^0 + 3ea_B\mathcal{E}$ невырождены, а средний E_2^0 — дважды вырожден, ему соответствуют две волновые функции ψ_{211} и ψ_{21-1} . Отметим, что даже для полей $\mathcal{E} \sim 10^4 \text{ В/см}$ полное расщепление уровней $\Delta E = 6ea_B\mathcal{E} \sim 3 \cdot 10^{-4} \text{ эВ}$ оказывается много меньше, чем расстояние до ближайшего уровня $E_3^0 - E_2^0 = 1,9 \text{ эВ}$.

Глава V

ТЕОРИЯ РАССЕЯНИЯ

§ 32. Постановка задачи рассеяния. Амплитуда рассеяния

Пусть происходит рассеяние частиц потенциальным полем $U(\mathbf{r})$ с характерным радиусом действия сил порядка a . Мы рассматриваем решение стационарного уравнение Шрёдингера

$$(\Delta + k^2) \psi(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}), \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (32.1)$$

которое на больших расстояниях $r \gg a$ имеет вид суперпозиции падающей плоской волны и сферической волны, расходящейся

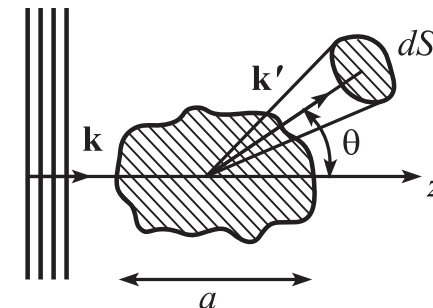


Рис. 24. Схема процесса рассеяния

от центра (рис. 24):

$$\psi = \psi_{\text{пад}} + \psi_{\text{рас}} = e^{ikz} + f \frac{e^{ikr}}{r} \quad \text{при } r \gg a. \quad (32.2)$$

Падающей волне соответствует волновой вектор $\mathbf{k} = (0, 0, k)$. Рассеянную волну рассматриваем вблизи точки со сферическими координатами r, θ, φ на большом расстоянии $r \gg a$ от рассеивающего центра, этой волне соответствует волновой вектор

$$\mathbf{k}' = k \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad |\mathbf{k}'| = k.$$

Амплитуда сферической волны f является функцией энергии налетающей частицы и углов рассеяния

$$f = f(k, \theta, \varphi)$$

и называется *амплитудой рассеяния*.

Как известно, дифференциальное сечение рассеяния $d\sigma$ равно отношению числа частиц $d\dot{N}$, рассеянных в единицу времени в элемент телесного угла $d\Omega$, к плотности потока падающих частиц $(\mathbf{j}_{\text{пад}})_z$:

$$d\sigma = \frac{d\dot{N}}{(\mathbf{j}_{\text{пад}})_z}.$$

Из уравнения (2) находим:

$$(\mathbf{j}_{\text{пад}})_z = \frac{\hbar k}{m}, \quad d\dot{N} = (\mathbf{j}_{\text{рас}})_r dS = (\mathbf{j}_{\text{рас}})_r r^2 d\Omega,$$

$$(\mathbf{j}_{\text{рас}})_r = -\frac{i\hbar}{2m} \psi_{\text{рас}}^* \frac{\partial \psi_{\text{рас}}}{\partial r} + \left(-\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial \psi_{\text{рас}}}{\partial r} \right)^* \psi_{\text{рас}} = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f|^2}{r^2}.$$

В итоге получаем

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f|^2.$$

Заметим, что, обсуждая сечение, мы имеем в виду расстояния r , большие не только по сравнению с a , радиусом действия сил, но и с дебройлевской длиной волны $\lambda = 2\pi/k$.

От дифференциального уравнения Шредингера (1) и граничного условия (2) удобно перейти к интегральному уравнению

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3r'. \quad (32.3)$$

Такой переход можно обосновать известными из электродинамики результатами (см. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. М.: Наука, 1988. § 64). Действительно, в электродинамике волновое уравнение

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \varphi(\mathbf{r}, t) = -4\pi\rho(\mathbf{r}, t)$$

при гармонической зависимости от времени потенциалов и плотностей зарядов

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}, \quad \rho(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}) e^{-i\omega t}$$

имеет вид

$$(\Delta + k^2)\varphi(\mathbf{r}) = -4\pi\rho(\mathbf{r}), \quad k = \omega/c, \quad (32.4)$$

аналогичный (1) с заменой

$$\varphi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi(\mathbf{r}), \quad \rho(\mathbf{r}) \rightarrow -\frac{m}{2\pi\hbar^2} U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}).$$

Решение же уравнения (4) в форме запаздывающих потенциалов таково:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int \frac{e^{ikR}}{R} \rho(\mathbf{r}') d^3r', \quad R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|,$$

что соответствует суперпозиции сферических волн

$$\frac{e^{ikR}}{R},$$

расходящихся из центров \mathbf{r}' , в которых сосредоточены заряды $\rho(\mathbf{r}') d^3r'$, к точке наблюдения \mathbf{r} .

При $r \gg a$ соотношение (3) приводится к виду (2). Действительно, при этом

$$k |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = k \sqrt{r^2 - 2\mathbf{r}\mathbf{r}' + r'^2} \approx k \left(r - \frac{\mathbf{r}\mathbf{r}'}{r} \right) = kr - \mathbf{k}'\mathbf{r}',$$

так что

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3r. \quad (32.5)$$

§ 33. Борновское приближение. Формула Резерфорда. Атомный формфактор

33.1. Борновское приближение

Рассматриваем потенциальную энергию как возмущение. Для получения амплитуды рассеяния в первом порядке по потенциалу взаимодействия подставим в (32.5) невозмущенную волновую функцию

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \psi^{(0)}(\mathbf{r}) = e^{ikz} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$$

и получим амплитуду рассеяния в виде

$$f(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) d^3r, \quad \mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}, \quad q = 2k \sin \frac{\theta}{2}.$$

Таким образом, в борновском приближении амплитуда рассеяния определяется фурье-образом потенциальной энергии рассеивающего поля.

Критерий применимости. Рассматривая потенциальную энергию как возмущение, получим обычный критерий для теории возмущений — поправка первого порядка к волновой функции $\psi^{(1)}(\mathbf{r})$ вблизи начала координат должна быть мала по сравнению с невозмущенной волновой функцией, т. е.

$$|\psi^{(1)}(0)| = \left| \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{i\mathbf{k}r'}}{r'} U(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3r' \right| \ll |\psi^{(0)}| = 1.$$

Это даёт для сферически симметричного потенциала условие

$$\frac{m}{\hbar^2 k} \left| \int_0^\infty U(r) (1 - e^{2ikr}) dr \right| \ll 1.$$

Для медленных частиц (при $ka \ll 1$) легко получить оценку

$$\int_0^\infty U(r) (1 - e^{2ikr}) dr \approx 2ik \int_0^\infty U(r)r dr \sim ikU(a)a^2,$$

или $|U(a)| \ll \hbar^2/(ma^2)$. Для быстрых частиц (при $ka \gg 1$) вклад слагаемого с быстро изменяющейся экспонентой e^{2ikr} мал, и потому

$$\int_0^\infty U(r) (1 - e^{2ikr}) dr \approx \int_0^\infty U(r) dr \sim U(a)a$$

или $|U(a)| \ll \hbar^2 k/a = \hbar v/a$. Таким образом, условие применимости борновского приближения имеет вид

$$|U(a)| \ll \begin{cases} \frac{\hbar^2}{ma^2} & \text{при } ka \ll 1 \\ \frac{\hbar v}{a} & \text{при } ka \gg 1. \end{cases}$$

Иными словами, характерная потенциальная энергия $|U(a)|$ должна быть мала либо (для медленных частиц) по сравнению с характерной энергией

$$E_{\text{хар}} \sim \frac{\hbar^2}{ma^2},$$

либо (для быстрых частиц) по сравнению с

$$E_{\text{хар}} \cdot ka$$

(в последнем случае $|U(a)|$ может быть и не мала по сравнению с $E_{\text{хар}}$).

Критерий применимости борновского приближения для рассеяния медленных частиц $|U(a)| \ll \hbar^2/(ma^2)$ соответствует

тому, что в случае притягивающего потенциала притяжение недостаточно для образования связанного состояния. В случае быстрых частиц условие $|U(a)| \ll \hbar v/a$ соответствует тому, что неопределённость в энергии, связанная с временем пролета, должна быть много больше потенциала взаимодействия; условие $ka \gg 1$ обеспечивает здесь применимость квазиклассического рассмотрения.

33.2. Формула Резерфорда

Для кулоновского поля

$$U(r) = -\frac{\alpha}{r}$$

критерий применимости борновского приближения таков:

$$\frac{\alpha}{\hbar v} \ll 1.$$

В этом случае борновская амплитуда равна

$$f = \frac{2\alpha m}{\hbar^2 q^2},$$

а сечение рассеяния

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{\alpha}{2pv \sin^2(\theta/2)} \right]^2 = \frac{\alpha^2}{16E^2 \sin^4(\theta/2)}$$

совпадает с классическим. Отметим без доказательства, что борновская формула для сечения совпадает с точной (это верно лишь в нерелятивистском приближении). Полное сечение (как и в классической механике) равно бесконечности. Это означает, что в реальном эксперименте полное число рассеянных в единицу времени частиц совпадает с числом частиц, падающих в единицу времени на мишень.

33.3. Атомный формфактор

При упругом рассеянии быстрых электронов на атоме последний можно рассматривать как источник статического потенциала $\varphi(r)$, создаваемого средним распределением зарядов в атоме:

$$\rho(\mathbf{r}) = Ze\delta(\mathbf{r}) - en(r).$$

В этой формуле первое слагаемое в правой части соответствует точечному ядру, а второе — распределению электронов в атоме с плотностью $n(r)$.

Пусть $\varphi_{\mathbf{q}}$ и $\rho_{\mathbf{q}}$ — фурье-образы потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ и плотности заряда $\rho(\mathbf{r})$. Так как $\Delta\varphi(\mathbf{r}) = -4\pi\rho(\mathbf{r})$, то из

$$\Delta(\varphi_{\mathbf{q}}e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}) = -q^2\varphi_{\mathbf{q}}e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = -4\pi\rho_{\mathbf{q}}e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$$

следует, что

$$\varphi_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi\rho_{\mathbf{q}}}{q^2}.$$

Таким образом, амплитуда рассеяния в этом случае равна

$$f(\mathbf{q}) = \frac{2e^2m}{\hbar^2 q^2} [Z - F(\mathbf{q})].$$

Здесь введен так называемый *атомный формфактор*

$$F(\mathbf{q}) = \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} n(r) d^3r,$$

представляющий собой фурье-образ распределения электронов в атоме.

При $qa \gg 1$, т. е. при углах рассеяния $\theta \gg 1/(ka)$, формфактор $|F| \ll Z$ и сечение совпадает с резерфордовским. Это вполне естественно: большие углы рассеяния соответствуют малым прицельным параметрам, при которых налетающая частица рассеивается ядром, практически не экранированным.

При $qa \ll 1$ имеем

$$Z - F(\mathbf{q}) \approx \frac{1}{6} q^2 \int r^2 n(r) d^3r = \frac{1}{6} q^2 \langle r^2 \rangle.$$

В этой области рассеяние изотропно:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{9} \left(\frac{\langle r^2 \rangle}{a_B} \right)^2.$$

Таким образом, при рассеянии на атоме полное сечение оказывается (в отличие от Резерфордовского) конечным.

Пример: рассеяние на атоме водорода.

В этом случае $Z = 1$, $n(r) = |\psi_{100}(r)|^2$, поэтому атомный формфактор в этом случае равен

$$F(\mathbf{q}) = \frac{1}{(1+u)^2}, \quad u = \frac{1}{4} q^2 a_B^2 = [ka_B \sin(\theta/2)]^2,$$

а дифференциальное и полное сечения таковы:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(1 + \frac{1}{2}u)^2}{(1+u)^4} a_B^2, \quad \sigma = \frac{7\pi}{6} \frac{(e^2/a_B)}{E} a_B^2.$$

Указанному распределению зарядов соответствует потенциальная энергия

$$U(r) = -e\varphi(r) = -\frac{e^2}{r} \left(1 + \frac{r}{a_B} \right) e^{-2r/a_B}.$$

В классической механике в таком поле полное сечение $\sigma = \infty$, что находится в резком противоречии с квантовым (правильным!) результатом.

Опыты по рассеянию быстрых электронов на ядрах дали сведения о формфакторе ядра, т. е. о распределении электрического заряда внутри ядра. Аналогичные опыты при рассеянии

ультрарелятивистских электронов с большой передачей энергии и импульса (так называемое *глубокоупругое рассеяние*) на протоне и нейтроне привели к кварковой модели строения адронов.

33.4. Конечные сечения в квантовой механике

Обсудим подробнее вопрос о том, какие потенциалы приводят в квантовой механике к конечным сечениям. Пусть на больших расстояниях

$$U(r) \sim \frac{\alpha}{r^n}, \quad n > 0.$$

В классической механике при рассеянии в таком поле полное сечение бесконечно, так как любым большим прицельным параметрам ρ соответствуют хотя и малые, но конечные классические углы отклонения, которые можно оценить таким образом:

$$\theta_{\text{класс}} \sim \frac{p_{\perp}}{p_z} \sim \frac{F_{\perp} t}{mv},$$

что с учетом

$$F_{\perp} \sim \frac{\alpha}{\rho^{n+1}}, \quad t \sim \frac{\rho}{v}$$

дает оценку

$$\theta_{\text{класс}} \sim \frac{\alpha}{\rho^n E}.$$

В квантовой механике для частицы с прицельным параметром ρ (у нее $\Delta r_{\perp} < \rho$) неопределённость поперечного импульса

$$\Delta p_{\perp} \gtrsim \frac{\hbar}{\Delta r_{\perp}} > \frac{\hbar}{\rho},$$

поэтому квантовая неопределённость угла отклонения равна

$$\Delta \theta_{\text{кв}} \sim \frac{\Delta p_{\perp}}{p_z} > \frac{\hbar}{\rho m v}.$$

Таким образом, при $n > 1$ неопределённость $\Delta\theta_{\text{кв}} > \theta_{\text{класс}}$, и поэтому квантово-механические результаты могут существенно отличаться от классических.

Зная поведение $U(r)$ на больших расстояниях, где взаимодействие всегда слабое и поэтому борновское приближение применимо, можно оценить поведение амплитуды в области малых углов рассеяния:

$$f(\mathbf{q}) \propto \int_{r_0}^{\infty} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{\alpha}{r^n} d^3r \propto \frac{1}{q^{3-n}} \propto \frac{1}{\theta^{3-n}}.$$

Отсюда получаем, что дифференциальное сечение

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \frac{1}{(\theta^2)^{3-n}}$$

конечно при $\theta \rightarrow 0$, если $n > 3$, а полное сечение

$$\sigma \propto \int \frac{d\theta^2}{(\theta^2)^{3-n}}$$

конечно при $n > 2$.

Задачи

33.1. Рассеяние на прямоугольной потенциальной яме в борновском приближении (задача 1 к § 126 из [1]). Обсудить условия применимости приближения.

33.2. То же для потенциала Юкава $U(r) = (\alpha/r) e^{-r/a}$.

33.3. То же для потенциала $U(r) = V e^{-r/a}$.

33.4. То же для кулоновского потенциала $U(r) = \alpha/r$ (предельный случай потенциала Юкавы при $a \rightarrow \infty$).

§ 34. Фазовая теория рассеяния

34.1. Связь сечения упругого рассеяния с фазами рассеяния

Рассеяние на сферически симметричном потенциале обладает цилиндрической симметрией, т. е. $\psi(\mathbf{r})$ зависит лишь от r и θ , но не от φ . Поэтому разложение этого решения по парциальным волнам содержит лишь $Y_{l0}(\theta, \varphi) \propto P_l(\cos \theta)$:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l P_l(\cos \theta) R_{kl}(r). \quad (34.1)$$

Как известно (см. § 24), радиальная функция $R_{kl}(r)$ на больших расстояниях имеет вид

$$R_{kl}(r) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right) \quad \text{при } r \rightarrow \infty.$$

При свободном движении фаза рассеяния $\delta_l = 0$. В частности, плоской волне вдоль оси z соответствует разложение по парциальным волнам вида (см. [1], § 34):

$$e^{ikz} = e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} c_l P_l(\cos \theta) R_{kl}^{(0)}(r), \quad c_l = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{i^l}{k} (2l+1),$$

$$R_{kl}^{(0)}(r) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right) \quad \text{при } r \rightarrow \infty.$$

Чтобы выполнялось граничное условие (32.2), т. е. чтобы разность $\psi(\mathbf{r}) - e^{ikz}$ имела вид сферической волны, расходящейся от центра, $f \cdot (e^{ikr}/r)$, необходимо

$$a_l = c_l e^{i\delta_l} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{i^l}{k} (2l+1) e^{i\delta_l}.$$

Тогда амплитуда рассеяния равна

$$f(k, \theta) = \sum_l (2l+1) f_l(k) P_l(\cos \theta),$$

где парциальная амплитуда

$$f_l(k) = \frac{S_l(k) - 1}{2ik}, \quad S_l(k) = e^{2i\delta_l(k)}.$$

Отсюда полное сечение упругого рассеяния

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{el}} &= \int |f|^2 d\Omega = 4\pi \sum_l (2l+1) |f_l(k)|^2 = \\ &= \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) |S_l(k) - 1|^2. \end{aligned}$$

Парциальные амплитуды и полное сечение полностью определяются фазами рассеяния $\delta_l(k)$. Сами фазы рассеяния могут быть найдены, например, из углового распределения частиц: $d\sigma/d\Omega = |f(k, \theta)|^2$.

34.2. Понятие о неупругом сечении

Решение (1) при $r \rightarrow \infty$ можно представить не только в виде (32.2), но и в виде двух сферических волн — расходящейся от центра и сходящейся к центру:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &\rightarrow \tilde{\psi}_{\text{рас}} + \psi_{\text{сх}} = \\ &= \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) P_l(\cos\theta) \left[S_l \frac{e^{ikr}}{r} - (-1)^l \frac{e^{-ikr}}{r} \right] \quad \text{при } r \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (34.2)$$

(разумеется, при таком разбиении расходящаяся волна $\tilde{\psi}_{\text{рас}}$ отличается от $\psi_{\text{рас}}$ в (32.2)). Парциальная амплитуда расходящейся волны отличается множителем

$$(-1)^{l+1} S_l \quad (34.3)$$

от соответствующей амплитуды в сходящейся волне. Если нет поглощения частиц силовым центром, то этот множитель должен быть по модулю равен единице,

$$|S_l| = 1.$$

Если есть поглощение, то $|S_l| < 1$, а величина $|S_l|^2$ характеризует уменьшение потока частиц в расходящейся волне по сравнению с потоком частиц в сходящейся⁵. Действительно, разница

$$\begin{aligned} |\dot{N}_{\text{сх}}| - \dot{N}_{\text{рас}} &= \int [-(\mathbf{j}_{\text{сх}})_r - (\mathbf{j}_{\text{рас}})_r] r^2 d\Omega = \\ &= \frac{\pi\hbar}{mk} \sum_l (2l+1) (1 - |S_l|^2). \end{aligned}$$

Поэтому неупругое сечение равно

$$\sigma_{\text{in}} = \frac{|\dot{N}_{\text{сх}}| - \dot{N}_{\text{рас}}}{(\mathbf{j}_{\text{пад}})_z} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) (1 - |S_l|^2).$$

34.3. Оптическая теорема

Для процессов рассеяния и поглощения существуют определённые ограничения и связи. Введем понятие парциального сечения $\sigma^{(l)}$, представив

$$\sigma = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma^{(l)}.$$

В классической механике ($l \gg 1$) момент импульса

$$M = p\rho_l = \hbar k\rho_l = \hbar l,$$

поэтому

$$\rho_l = \frac{l}{k} = \lambda l, \quad \lambda = \frac{\lambda}{2\pi} = \frac{1}{k},$$

а под парциальным сечением $\sigma_{\text{класс}}^{(l)}$ естественно понимать площадь кольца между окружностями радиусов ρ_{l+1} и ρ_l , т. е.

$$\sigma_{\text{класс}}^{(l)} = \pi(\rho_{l+1}^2 - \rho_l^2) = \pi \lambda^2 (2l+1).$$

⁵В обсуждаемой схеме потенциального рассеяния поглощение частиц может быть формально описано введением мнимой части у потенциальной энергии, подобно тому как в оптике поглощение волн средой может быть описано введением мнимой части у показателя преломления.

Парциальные сечения для упругого $\sigma_{\text{el}}^{(l)}$, неупругого $\sigma_{\text{in}}^{(l)}$ и полного

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{in}}$$

сечений можно записать в виде

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{el}}^{(l)} &= \sigma_{\text{класс}}^{(l)} \cdot |1 - S_l|^2, \quad \sigma_{\text{in}}^{(l)} = \sigma_{\text{класс}}^{(l)} \cdot (1 - |S_l|^2), \\ \sigma_{\text{tot}}^{(l)} &= \sigma_{\text{класс}}^{(l)} \cdot 2(1 - \text{Re } S_l).\end{aligned}$$

При $S_l = 1$ нет ни поглощения, ни рассеяния; при $|S_l| = 1$ есть только рассеяние, но нет поглощения. Так как $|S_l| \leq 1$, то

$$\sigma_{\text{el}}^{(l)} \leq \sigma_{\text{tot}}^{(l)} \leq 4\sigma_{\text{класс}}^{(l)}, \quad \sigma_{\text{in}}^{(l)} \leq \sigma_{\text{класс}}^{(l)}.$$

Если есть поглощение частиц (при этом $|S_l| < 1$), то непременно происходит и рассеяние частиц. Поглощение максимально при $S_l = 0$, и в этом случае

$$\sigma_{\text{in}}^{(l)} = \sigma_{\text{el}}^{(l)} = \sigma_{\text{класс}}^{(l)}, \quad \sigma_{\text{tot}}^{(l)} = 2\sigma_{\text{класс}}^{(l)}.$$

Еще одно соотношение возникает, если сравнить

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{in}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) 2(1 - \text{Re } S_l)$$

с выражением для мнимой частицы амплитуды рассеяния на угол нуль:

$$\begin{aligned}\text{Im } f(k, \theta = 0) &= \sum_l (2l+1) P_l(1) \text{Im} \frac{S_l - 1}{2ik} = \\ &= \frac{1}{2k} \sum_l (2l+1)(1 - \text{Re } S_l).\end{aligned}$$

Отсюда получаем оптическую теорему:

$$\text{Im } f(k, \theta = 0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}}.$$

Её смысл тот же, что и в оптике: ослабление падающего потока из-за рассеяния происходит за счет интерференции падающей волны и волны, рассеянной под очень малыми углами.

34.4. Упругое рассеяние медленных частиц

При $ka \ll 1$ прицельные параметры $\rho_l = l/k \gg a$ для $l \geq 1$, поэтому лишь s -волна может давать заметное рассеяние. Таким образом, для медленных частиц амплитуда рассеяния

$$f = \frac{e^{2i\delta_0} - 1}{2ik},$$

дифференциальное сечение изотропно:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sigma}{4\pi},$$

а полное сечение определяется фазой s -волны:

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0.$$

34.5. Дифракционное рассеяние быстрых частиц на чёрном шаре

Пусть идеально поглощающий (чёрный) шар имеет радиус a . Рассмотрим рассеяние быстрых ($ka \gg 1$) частиц на таком шаре (пример: нейтроны с энергией $E \sim 100$ МэВ рассеиваются на тяжёлом ядре радиуса $a \sim 10^{-12}$ см, при этом $ka \sim 10$). Эта задача вполне аналогична дифракции плоской световой волны на черном шаре. Прицельный параметр $\rho_{l_0} = a$ соответствует $l_0 = ka \gg 1$. При $l > l_0$ частицы не сталкиваются с шаром, $S_l = 1$. При $l < l_0$ частицы полностью поглощаются, $S_l = 0$. Строго говоря, эти утверждения справедливы лишь для $l \gg l_0$ и $l \ll l_0$, но область $l \approx l_0$ не дает большого вклада в сечение. Таким образом,

$$\sigma_{\text{el}} = \sigma_{\text{in}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) = \frac{\pi}{k^2} \int_0^{l_0} 2l dl = \pi a^2, \quad \sigma_{\text{tot}} = 2\pi a^2,$$

т. е. полное сечение вдвое больше классического сечения $\sigma_{\text{класс}} = \pi a^2$.

Амплитуда упругого рассеяния велика лишь в области малых углов рассеяния $\theta \lesssim 1/(ka) \ll 1$, а в этой области $P_l(\cos \theta) = J_0(l\theta)$, так что

$$f(k, \theta) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) P_l(\cos \theta) = \frac{i}{k} \int_0^{l_0} l J_0(l\theta) dl.$$

Если далее воспользоваться известным соотношением для функций Бесселя

$$x J_0(x) = \frac{d[x J_1(x)]}{dx},$$

то окончательно получим

$$f(k, \theta) = \frac{ia}{\theta} J_1(ka\theta).$$

Отсюда дифференциальное сечение упругого рассеяния

$$\frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega} = |f|^2 = \frac{1}{4} a^2 \cdot \begin{cases} (ka)^2 & \text{при } \theta \ll 1/(ka) \\ \frac{8}{\pi ka\theta^3} \sin^2(ka\theta - \frac{\pi}{4}) & \text{при } \theta \gg 1/(ka). \end{cases}$$

34.6. Упругое рассеяние быстрых частиц на идеально отражающем шаре

Пусть радиус шара равен a и $ka \gg 1$. Полное сечение определяет число частиц, выбывших из начального пучка. В классической механике это сечение, равное πa^2 , связано лишь с прямым столкновением с мишенью. С учетом волновых свойств частиц их выбывание из пучка, т. е. изменение начального импульса, связано также с дифракцией.

Как и в § 34.5, $S_l = 1$ при $l > l_0$. При $l < l_0$ решение уравнения Шредингера для радиальной волновой функции имеет вид

$R_{kl}(r) = 0$ при $r < a$ и

$$R_{kl}(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sin(kr - \frac{1}{2}\pi l + \delta_l) \quad \text{при } r > a.$$

Сшивка при $r = a$ даёт

$$\delta_l \approx -(ka - \frac{1}{2}\pi l).$$

Для нахождения полного сечения используем оптическую теорему, что приводит к ответу:

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1)(1 - \cos 2\delta_l).$$

Слагаемые, содержащие

$$\cos 2\delta_l \approx (-1)^l \cos(2ka),$$

быстро осциллируют при изменении l , и поэтому их вкладом в сумму можно пренебречь. В итоге получаем

$$\sigma = 2\pi a^2,$$

что вдвое превышает классическое сечение $\sigma_{\text{класс}} = \pi a^2$.

В данном случае отличие от классического результата связано с наличием помимо квазиклассического рассеяния, обусловленного углами $\theta \gg 1/(ka)$, еще и дифракционного рассеяния на малые углы $\theta \lesssim 1/(ka)$. Более подробно об этом случае можно прочесть в задаче 13.32 из [4].

Для классических частиц дифракция практически не наблюдается. Так, для частицы с $m \sim 1$ г и $v \sim 1$ см/с углы дифракции на шаре радиуса $a \sim 1$ см настолько малы,

$$\theta_{\text{диф}} \sim \frac{\hbar}{mva} \sim 10^{-27},$$

что увидеть это рассеяние можно было бы лишь на расстояниях

$$r \sim \frac{a}{\theta_{\text{диф}}} \sim 10^{27} \text{ см}.$$

34.7. Резонансное рассеяние

Рассмотрим рассеяние в таком поле $U(r)$, в котором имеется квазистационарное состояние. Напомним (см. § 21–22), что квазистационарное состояние можно формально рассматривать как состояние с комплексной энергией вида $E_r - \frac{i}{2}\Gamma$, в которой мнимая часть определяет ширину состояния Γ . В таком поле сечение рассеяния и фазы рассеяния имеют характерное — *резонансное* — поведение в зависимости от энергии налетающих частиц E в области значений, близких к энергии резонанса E_r . Часто именно изучение поведения сечения рассеяния в зависимости от E даёт сведения о нестабильных ядрах и элементарных частицах-резонансах.

Пусть $R_{kl}(r)$ — радиальная функция, соответствующая стационарной задаче рассеяния. Перепишем асимптотическое (при $r \rightarrow \infty$) выражение

$$R_{kl}(r) \rightarrow \frac{\sqrt{2/\pi}}{r} \sin(kr - \frac{1}{2}\pi l + \delta_l)$$

в виде суммы сходящихся и расходящихся волн:

$$R_{kl}(r) \rightarrow \frac{\sqrt{2/\pi}}{2r} [A_l(E) e^{ikr} + B_l(E) e^{-ikr}],$$

где функции $A_l(E)$ и $B_l(E)$, равные

$$A_l(E) = B_l^*(E) = \frac{1}{i} e^{i(\delta_l - \frac{1}{2}\pi l)} = (-i)^{l+1} e^{i\delta_l},$$

связаны с $S_l(E)$ соотношением (ср. (2)–(3))

$$\frac{A_l(E)}{B_l(E)} = (-1)^{l+1} S_l(E).$$

Тогда парциальная амплитуда рассеяния равна

$$f_l(E) = \frac{1}{2ik} (S_l - 1) = \frac{1}{2ik} \left[\frac{A_l(E)}{B_l(E)} (-1)^{l+1} - 1 \right]. \quad (34.4)$$

Известно (см. формулы (22.1)–(22.2)), что при $E = E_r - \frac{i}{2}\Gamma$ радиальная функция $R_{kl}(r)$ на больших расстояниях содержит только расходящуюся волну. Поэтому потребуем, чтобы (ср. (22.2))

$$B_l(E_r - \frac{i}{2}\Gamma) = 0.$$

Отсюда следует, что парциальная амплитуда рассеяния (4) должна иметь полюс при $E = E_r - \frac{i}{2}\Gamma$.

Пусть вблизи этого полюса

$$B_l(E) \approx \beta_l \cdot (E - E_r + \frac{i}{2}\Gamma),$$

тогда

$$S_l(E) = e^{2i\delta_l} \approx (-1)^{l+1} \frac{\beta_l^* (E - E_r - \frac{i}{2}\Gamma)}{\beta_l (E - E_r + \frac{i}{2}\Gamma)}. \quad (34.5)$$

Вдали от резонанса, при $|E - E_r| \gg \Gamma$, из (5) получим:

$$S_l^{(0)} = e^{2i\delta_l^{(0)}} \approx (-1)^{l+1} \frac{\beta_l^*}{\beta_l}, \quad (34.6)$$

где $\delta_l^{(0)}$ — фаза рассеяния вдали от резонанса. Теперь формулу (5) можно переписать в виде

$$S_l(E) \approx e^{2i\delta_l^{(0)}} \frac{E - E_r - \frac{i}{2}\Gamma}{E - E_r + \frac{i}{2}\Gamma} = S_l^{(0)} - \frac{i\Gamma}{E - E_r + \frac{i}{2}\Gamma} e^{2i\delta_l^{(0)}}, \quad (34.7)$$

а формулу для парциальной амплитуды в виде

$$f_l(E) \approx f_l^{(0)} - \frac{1}{2k} \frac{\Gamma}{E - E_r + \frac{i}{2}\Gamma} e^{2i\delta_l^{(0)}},$$

где $f_l^{(0)}$ — амплитуда рассеяния вдали от резонанса. Если вблизи резонанса вкладом $f_l^{(0)}$ можно пренебречь, то парциальное сечение имеет резонансную зависимость от энергии (рис. 25):

$$\sigma^{(l)} = 4\pi(2l+1) |f_l|^2 \rightarrow \frac{\pi}{k^2} (2l+1) \frac{\Gamma^2}{(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (34.8)$$

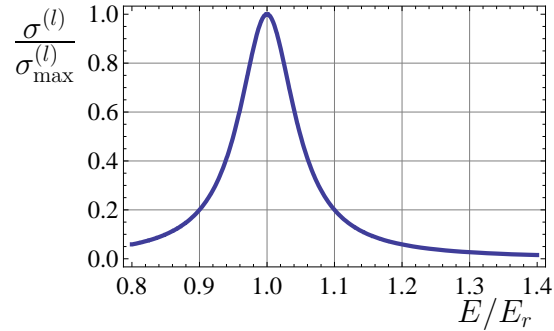


Рис. 25. Зависимость частичного сечения $\sigma^{(l)}(E)$ от E вблизи резонанса и при $E = E_r$ достигает максимально возможного значения

$$\sigma_{\max}^{(l)} = \frac{4\pi}{k^2} (2l + 1).$$

Учет вклада нерезонансного слагаемого $f_l^{(0)}$ может привести к искажению резонансной кривой (8).

Рассмотрим теперь поведение фазы рассеяния при изменении энергии. Поскольку отношение $(E - E_r - \frac{i}{2}\Gamma)/(E - E_r + \frac{i}{2}\Gamma)$ можно переписать в виде

$$\frac{E - E_r - \frac{i}{2}\Gamma}{E - E_r + \frac{i}{2}\Gamma} = \exp \left[-2i \operatorname{arctg} \frac{2(E - E_r)}{\Gamma} \right],$$

то, используя (5)–(7), для фазы рассеяния получим выражение

$$\delta_l \approx \delta_l^{(0)} - \operatorname{arctg} \frac{\Gamma}{2(E - E_r)}, \quad (34.9)$$

из которого видно, что при прохождении через резонанс фаза рассеяния изменяется на π (рис. 26).

Аналогичным образом можно рассмотреть аналитическое продолжение по k функций $R_{kl}(r)$ и $f_l(k)$ в область отрицательных значений E (что соответствует $k \rightarrow i\kappa$), при этом окажется, что связанным состояниям с энергией $E_n < 0$ соответствуют полюса амплитуды рассеяния при $E = E_n$.

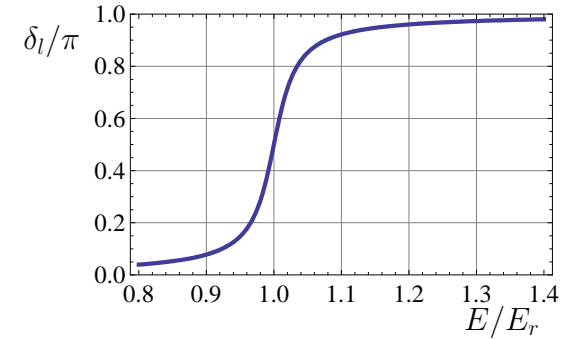


Рис. 26. Зависимость фазы рассеяния $\delta_l(E)$ от E вблизи резонанса

Задачи

34.1. Вычислить сечение рассеяния медленных частиц в поле $U(r) = -G \delta(r - a)$ в условиях резонанса в s -волне.

34.2. Найти сечение рассеяния медленных частиц в случае:

- а) сферической прямоугольной потенциальной ямы (включая и резонансное рассеяние);
- б) сферического прямоугольного потенциального барьера.

34.3. Найти фазовые сдвиги $\delta_l(k)$ в поле $U(r) = \alpha/r^2$, $\alpha > 0$. Выполнить суммирование ряда, представляющего разложение амплитуды по частичным волнам, в случае $m\alpha/\hbar^2 \ll 1$ при произвольных углах рассеяния. Найти $d\sigma/d\Omega$ и σ . Сравнить с классическим рассеянием на малые углы.

34.4. Как ведет себя сечение неупругого рассеяния в пределе малых скоростей?

В классической электродинамике средняя сила, действующая на атом в поперечном (вдоль оси z) направлении,

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$$

может принимать любые значения из интервала

$$-\mu \left| \frac{\partial B_z}{\partial z} \right| \leq F_z \leq +\mu \left| \frac{\partial B_z}{\partial z} \right|,$$

что приводило бы лишь к размытию на пластинке линии, вдоль которой осаждались пролетевшие атомы.

В квантовой механике $\hat{\mathbf{M}} = \hbar \hat{\mathbf{L}}$, и потому оператор

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_L = -\mu_B \hat{\mathbf{L}},$$

где магнетон Бора

$$\mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e c}.$$

Величина

$$\hat{\mu}_z = -\mu_B \hat{L}_z$$

принимает дискретный ряд значений

$$-\mu_B l, \mu_B(l-1), \dots, +\mu_B l,$$

что должно привести к появлению на пластинке $2l+1$ полос.

Однако в опыте с атомами серебра на пластинке появились две полосы, что формально соответствует равенству

$$2l+1=2, \text{ т. е. } l=1/2.$$

Гипотеза Уленбека и Гаудсмита (1925): электрон имеет собственный (не связанный с вращением вокруг ядра) момент импульса, или *спин* $\hbar \hat{\mathbf{s}}$, причем \hat{s}_z имеет два собственных значения $\pm 1/2$. Следует отметить, что механическая модель электрона в виде шарика радиуса $r_e = e^2/(m_e c^2)$, который вращается

Глава VI

СПИН

§ 35. Опыт Штерна – Герлаха

В классической теории магнитный момент атома

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2c} \sum_a e_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a$$

обусловлен в основном движением электронов

$$\boldsymbol{\mu} \approx -\frac{|e|\hbar}{2m_e c} \mathbf{M},$$

где

$$\mathbf{M} = \sum_e \mathbf{r}_e \times \mathbf{p}_e$$

— орбитальный момент импульса электронов. Взаимодействие нейтрального атома со внешним магнитным полем \mathbf{B} описывается добавкой

$$V = -\boldsymbol{\mu} \mathbf{B}$$

к функции Гамильтона. Во внешнем неоднородном магнитном поле на такой атом действует сила

$$\mathbf{F} = -\nabla V = (\boldsymbol{\mu} \nabla) \mathbf{B}.$$

В опыте Штерна и Герлаха (1921) нейтральные атомы серебра пролетали через поперечное неоднородное магнитное поле.

вокруг своей оси, несостоятельна, так как моменту импульса $\hbar/2 \sim m_e r_e v$ соответствует скорость вращения $v \sim \hbar/(m_e r_e) \sim \hbar c^2/e^2 = 137c$ (учёт релятивистских эффектов не спасает такую модель).

§ 36. Спин и спиноры

36.1. Оператор спина

Коммутационные соотношения (23.2) для компонент орбитального момента определяются лишь общими свойствами операции поворота, поэтому полученные в § 23 общие формулы справедливы и для спина. В частности,

$$[\hat{s}_j, \hat{s}_k] = i\varepsilon_{jkn}\hat{s}_n, \quad [\hat{s}_j, \hat{s}^2] = 0,$$

и поэтому существуют совместные собственные функции операторов \hat{s}^2 и \hat{s}_z , удовлетворяющие уравнениям

$$\begin{aligned} \hat{s}^2 |s, m\rangle &= s(s+1) |s, m\rangle = \frac{3}{4} |s, m\rangle, \\ \hat{s}_z |s, m\rangle &= m |s, m\rangle, \quad m = \pm s = \pm \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Введем краткие обозначения:

$$\begin{aligned} |s = \frac{1}{2}, m = +\frac{1}{2}\rangle &\equiv |+\rangle, \\ |s = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2}\rangle &\equiv |-\rangle. \end{aligned}$$

Любое спиновое состояние

$$|\chi\rangle$$

можно представить в виде

$$|\chi\rangle = a_1 |+\rangle + a_2 |-\rangle, \quad (36.1)$$

причем из условия нормировки $\langle \chi | \chi \rangle = 1$ для комплексных чисел $a_{1,2}$ следует условие

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1.$$

Из

$$\hat{s}_z |+\rangle = \frac{1}{2} |+\rangle$$

следует

$$\langle + | \hat{s}_z | + \rangle = \frac{1}{2}, \quad \langle - | \hat{s}_z | + \rangle = 0;$$

аналогично

$$\langle + | \hat{s}_z | - \rangle = 0, \quad \langle - | \hat{s}_z | - \rangle = -\frac{1}{2}.$$

Набор матричных элементов

$$\langle s, m' | \hat{s}_z | s, m \rangle$$

удобно представить в виде матрицы

$$\begin{pmatrix} \langle + | \hat{s}_z | + \rangle, & \langle + | \hat{s}_z | - \rangle \\ \langle - | \hat{s}_z | + \rangle, & \langle - | \hat{s}_z | - \rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Для операторов $\hat{l}_{\pm} = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$ мы выводили соотношения (23.10)

$$\hat{l}_{\pm} |l, m\rangle = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} |l, m \pm 1\rangle.$$

Подобным же образом получим

$$\hat{s}_+ |+\rangle = 0, \quad \hat{s}_+ |-\rangle = |+\rangle,$$

т. е. (ср. (23.11))

$$\hat{s}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_- = (\hat{s}_+)^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{s}_x = \frac{\hat{s}_+ + \hat{s}_-}{2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{\hat{s}_+ - \hat{s}_-}{2i} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Действие любого оператора \hat{s}_j на произвольное состояние (1) может быть описано, как действие соответствующей этому оператору матрицы на спинор

$$\chi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}.$$

36.2. Матрицы Паули

Пусть $\hat{\mathbf{s}}$ — оператор спина электрона. Определим матрицы Паули σ_x , σ_y , σ_z соотношением

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma},$$

тогда

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

Их свойства:

$$\sigma_j \sigma_k = I \delta_{jk} + i \varepsilon_{jkn} \sigma_n, \quad \text{Sp } \sigma_j = 0, \quad \text{Sp } I = 2,$$

где I — единичная матрица. Любую квадратную 2×2 матрицу A можно представить в виде

$$A = a_0 I + \mathbf{a} \boldsymbol{\sigma}, \quad a_0 = \frac{1}{2} \text{Sp } A, \quad \mathbf{a} = \frac{1}{2} \text{Sp } (A \boldsymbol{\sigma}).$$

36.3. Преобразование спиноров при поворотах и отражениях координат

Общий вид оператора поворота на угол θ вокруг оси \mathbf{n} нам известен (см. § 14). Для спинорной волновой функции этот оператор может быть представлен в виде матрицы

$$U_{\boldsymbol{\theta}} = e^{i \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \theta / 2}.$$

Так как для матриц Паули справедливы соотношения

$$(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n})^k = \begin{cases} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} & \text{если } k \text{ — нечётное число} \\ I & \text{если } k \text{ — чётное число} \end{cases},$$

то оператор поворота можно представить в виде

$$U_{\boldsymbol{\theta}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\theta/2)^k}{k!} (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n})^k = I \cos(\theta/2) + i \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \sin(\theta/2).$$

Поэтому закон преобразования спиноров при повороте таков:

$$\Psi'(\mathbf{r}', t) = U_{\boldsymbol{\theta}} \Psi(\mathbf{r}, t) = [I \cos(\theta/2) + i \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \sin(\theta/2)] \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (36.2)$$

при этом состояние Ψ' соответствует вектору спина, повернутому на угол $(-\theta \mathbf{n})$ по отношению к вектору спина в состоянии Ψ (см. § 23.1). Из (2) видно, что при повороте на 2π компоненты спиноров изменяют знак:

$$\Psi' = -\Psi \quad \text{при } \theta = 2\pi.$$

Покажем, что оператор спина при преобразованиях поворота ведет себя как вектор, т. е. преобразованный оператор $U^{-1} \boldsymbol{\sigma} U = \Lambda \boldsymbol{\sigma}$, где Λ — матрица поворота $\mathbf{r}' = \Lambda \mathbf{r}$.

Так как произвольный поворот может быть представлен как последовательность трех поворотов вокруг оси z , затем вокруг оси y и снова вокруг оси z , то достаточно рассмотреть поведение оператора спина при вращениях вокруг осей z и y . При повороте системы координат на угол θ вокруг оси z радиус-вектор преобразуется по закону

$$x' = x \cos \theta + y \sin \theta, \quad y' = -x \sin \theta + y \cos \theta, \quad z' = z,$$

а оператор поворота имеет вид

$$U_{\boldsymbol{\theta}} \equiv U_z(\theta) = \cos(\theta/2) + i \sigma_z \sin(\theta/2).$$

Используя свойства матриц Паули, получим

$$\begin{aligned} U_z^{-1}(\theta) \sigma_x U_z(\theta) &= \\ &= [I \cos(\theta/2) - i \sigma_z \sin(\theta/2)] \sigma_x [I \cos(\theta/2) + i \sigma_z \sin(\theta/2)] = \\ &= \sigma_x \cos \theta + \sigma_y \sin \theta, \end{aligned}$$

а также

$$U_z^{-1}(\theta) \sigma_y U_z(\theta) = -\sigma_x \sin \theta + \sigma_y \cos \theta; \quad U_z^{-1}(\theta) \sigma_z U_z(\theta) = \sigma_z,$$

т. е. в этом случае оператор спина преобразуется так же, как и радиус-вектор. Рассмотрим теперь поворот на угол θ вокруг оси y , при котором

$$x' = x \cos \theta - z \sin \theta, \quad z' = x \sin \theta + z \cos \theta, \quad y' = y.$$

Преобразования оператора спина в этом случае таковы:

$$\begin{aligned} U_y^{-1}(\theta) \sigma_x U_y(\theta) &= \\ &= [I \cos(\theta/2) - i\sigma_y \sin(\theta/2)] \sigma_x [I \cos(\theta/2) + i\sigma_y \sin(\theta/2)] = \\ &= \sigma_x \cos \theta - \sigma_z \sin \theta, \end{aligned}$$

а также

$$U_y^{-1}(\theta) \sigma_y U_y(\theta) = \sigma_x \sin \theta + \sigma_z \sin \theta; \quad U_y^{-1}(\theta) \sigma_y U_z(\theta) = \sigma_y,$$

т. е. и в этом случае оператор спина преобразуется так же, как и радиус-вектор. Таким образом, и при произвольном повороте оператор спина $\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ действительно преобразуется по обычному векторному закону:

$$U_{\theta}^{-1} \boldsymbol{\sigma} U_{\theta} = \Lambda \boldsymbol{\sigma}, \quad (36.3a)$$

где Λ — матрица поворота, соответствующая преобразованию

$$\mathbf{r}' = \Lambda \mathbf{r}. \quad (36.3b)$$

В частности, если спинору

$$\Psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

соответствует среднее значение вектора спина вдоль оси z , т. е.

$$\Psi^+ \boldsymbol{\sigma} \Psi = (0, 0, 1),$$

то спинору

$$\Psi_{\mathbf{n}} = U_z(-\varphi) U_y(-\theta) \Psi = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) e^{-i\varphi/2} \\ \sin(\theta/2) e^{i\varphi/2} \end{pmatrix}$$

соответствует среднее значение вектора спина вдоль единичного вектора

$$\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta),$$

т. е.

$$\Psi_{\mathbf{n}}^+ \boldsymbol{\sigma} \Psi_{\mathbf{n}} = \mathbf{n}.$$

При отражении координат $\mathbf{r}' = -\mathbf{r}$ спин (как и момент импульса $\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$) не изменяет своего значения. В частности, не изменяется и значение его z -проекции, поэтому каждая компонента спинора преобразуется только через саму себя. Кроме того, относительная фаза этих компонент, определяющая азимутальный угол направления спина, также не должна изменяться. В итоге,

$$\hat{P} \Psi(\mathbf{r}, t) = \eta_P \Psi(-\mathbf{r}, t), \quad (36.4)$$

где η_P — фазовый множитель. При двойном отражении мы вернемся к исходной системе координат. Если определить двойное отражение как тождественное преобразование, то $\eta_P^2 = 1$ и $\eta_P = \pm 1$. Если же определить двойное отражение как поворот на 2π , то $\eta_P^2 = -1$ и $\eta_P = \pm i$. Таким образом, при отражении координат матрица $U = \eta_P I$ и преобразованный оператор спина равен исходному:

$$U^{-1} \boldsymbol{\sigma} U = \boldsymbol{\sigma}. \quad (36.5)$$

В итоге при отражениях и поворотах системы координат оператор спина ведет себя как аксиальный вектор.

§ 37. Уравнение Паули

Магнитный момент заряженной частицы, обусловленный ее орбитальным движением $\hat{\boldsymbol{\mu}}_l$, связан с ее орбитальным момен-

том $\hat{\mathbf{I}}$ соотношением

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_l = \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\mathbf{I}}.$$

Связь же собственного магнитного момента частицы $\hat{\boldsymbol{\mu}}_s$ с ее спином $\hat{\mathbf{S}}$, как показывает опыт, зависит от вида частицы, в частности, для электрона, протона и нейтрона имеем:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_s = \mu_s 2\hat{\mathbf{S}} = \mu_s \boldsymbol{\sigma},$$

$$\mu_e = (-1,001\,159\,625\,187 \pm 4 \cdot 10^{-12}) \mu_B \approx -\mu_B = -\frac{|e|\hbar}{2m_e c},$$

$$\mu_p \approx 2,79 \mu_N, \quad \mu_n \approx -1,91 \mu_N, \quad \mu_N = \frac{|e|\hbar}{2m_p c}.$$

С учетом магнитного момента уравнение для движения частицы со спином $s = 1/2$ и зарядом e в электромагнитном поле принимает вид (В. Паули, 1927)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad \hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\phi - \hat{\boldsymbol{\mu}}_s \mathbf{B}, \quad (37.1)$$

в котором волновая функция — двухкомпонентный спинор

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}.$$

Плотность вероятности $\rho(\mathbf{r}, t)$ и условие нормировки таковы:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \Psi^+ \Psi \equiv |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2, \quad \int \rho(\mathbf{r}, t) d^3r = 1.$$

Уравнение движения спина электрона в магнитном поле

$$\frac{d\hat{\mathbf{S}}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{S}}] = \frac{1}{\hbar} \hat{\boldsymbol{\mu}}_e \times \mathbf{B} \approx -\frac{2\mu_B}{\hbar} \hat{\mathbf{S}} \times \mathbf{B}.$$

В случае квазиклассичности движения электрона, усредняя это уравнение по квазиклассическому волновому пакету, получим для средних значений:

$$\frac{d\mathbf{s}}{dt} \approx \frac{e}{mc} \mathbf{s} \times \mathbf{B}.$$

Аналогичное уравнение для скорости электрона имеет хорошо известный вид

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{e}{mc} \mathbf{v} \times \mathbf{B}.$$

Таким образом, в магнитном поле \mathbf{B} как вектор скорости, так и вектор спина электрона прецессируют вокруг направления магнитного поля \mathbf{B} с одной и той же (циклотронной) частотой

$$\boldsymbol{\omega}_c = -\frac{e\mathbf{B}}{mc}.$$

Поэтому проекция спина на направление скорости \mathbf{v} остается неизменной (учет малого отличия $\hat{\boldsymbol{\mu}}_e$ от $-2\mu_B \hat{\mathbf{S}}$ приводит к небольшому рассогласованию этих скоростей).

Покажите, что имеет место соотношение

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\phi - \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B} = \frac{1}{2m} \left(\boldsymbol{\sigma} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right)^2 + e\phi. \quad (37.2)$$

Оно окажется полезным в дальнейшем при анализе возможных релятивистских обобщений уравнения Паули.

Задачи

37.1. Найти $(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{b})$, $(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{a})^n$, $e^{i\boldsymbol{\sigma}\mathbf{a}}$, $e^{\boldsymbol{\sigma}\mathbf{a}}$, $U\boldsymbol{\sigma}_j U^{-1}$, где оператор $U = e^{i\boldsymbol{\sigma}_z \varphi/2}$.

37.2. Могут ли квадраты проекций электронного спина на оси x , y , z иметь одновременно определённые значения?

37.3. Показать, что для состояния, описываемого спиновой волновой функцией

$$\chi = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha e^{i\beta} \end{pmatrix}$$

(это наиболее общий вид нормированной волновой функции спинового состояния частицы со спином $s = 1/2$ при $0 \leq \alpha \leq$

$\pi/2, 0 \leq \beta < 2\pi$), можно указать такую ось в пространстве, проекция спина на которую имеет определённое значение $+1/2$. Найти полярный и азимутальный углы этой оси.

37.4. Найти

$$\int \psi^* \hat{\mathbf{1}} \psi d\Omega, \quad \text{где } \psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{11} + Y_{1-1}),$$

и сравнить полученный результат с результатом предыдущей задачи.

37.5. Найти состояние χ , для которого $\hat{s}_x \chi = \frac{1}{2} \chi$. То же для $\hat{s}_y \chi = \frac{1}{2} \chi$.

37.6. Для частицы со спином $s = 1/2$ указать закон преобразования спиновой волновой функции

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

при вращении системы координат на угол φ относительно оси, направление которой определяется единичным вектором \mathbf{n} . Показать, что величина $\chi_1^* \chi_2 \equiv a_1^* a_2 + b_1^* b_2$ не меняется при указанном преобразовании, т. е. является скаляром.

37.7. Найти относительные интенсивности расщепленных пучков нейтронов в опыте типа Штерна – Герлаха, если поляризованные вдоль оси x нейтроны движутся вдоль оси z , а магнитное поле \mathbf{B} направлено в плоскости xy под углом $\alpha = 45^\circ$ к оси x .

37.8. Распад $\Lambda \rightarrow p\pi^-$ (Фейнмановские лекции по физике. Вып. 9, гл. 15, § 5).

37.9. Рассматривается движение спина в магнитном поле.

Найти операторы скорости $\hat{\mathbf{v}}$ и ускорения $\hat{\mathbf{a}}$ (в шредингеровском представлении) нейтральной частицы (например, нейтрона), находящейся в магнитном поле.

Найти зависимость от времени спиновой функции и средних значений компонент спина нейтральной частицы со спином

$s = 1/2$ и магнитным моментом μ , находящейся в однородном постоянном магнитном поле \mathbf{B} .

Обобщить результат предыдущей задачи на случай однородного непостоянного магнитного поля, направление которого остается неизменным, т. е. $\mathbf{B}(t) = B(t) \mathbf{n}_0$.

Частица со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ находится в однородном магнитном поле $\mathbf{B}(t)$ вида

$$B_x = B_0 \cos \omega_0 t, \quad B_y = B_0 \sin \omega_0 t, \quad B_z = B_1,$$

где B_0, B_1, ω_0 – постоянные величины.

При $t = 0$ частица находилась в состоянии с проекцией спина на ось z , равной $s_z = 1/2$. Найти вероятность различных значений проекции спина на ось z в момент времени t . Обсудить, в частности, случай, когда $|B_1/B_0| \ll 1$; обратить внимание на резонансный характер зависимости вероятности “переворота” от частоты ω_0 в этом случае.

Глава VII

СЛОЖЕНИЕ МОМЕНТОВ

§ 38. Сложение моментов

Рассмотрим две подсистемы с заданными моментами j_1 и j_2 . Суммарный момент

$$\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2,$$

величина его j может принимать различные значения.

Примеры: система протон и нейтрон в s -состоянии (при этом $j_1 = s_1 = 1/2$, $j_2 = s_2 = 1/2$, $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$ — полный спин системы); орбитальный и спиновый момент электрона в атоме ($j_1 = l$, $j_2 = s = 1/2$, $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$) и т. д. Состояние подобной системы можно описать двумя различными способами:

1) Набором собственных функций коммутирующих операторов

$$\hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{j}_{1z}, \hat{\mathbf{j}}_2^2, \hat{j}_{2z}$$

с собственными значениями

$$j_1(j_1 + 1), m_1, j_2(j_2 + 1), m_2.$$

Обозначим эти функции как

$$\Psi_{m_1 m_2} = |j_1 m_1\rangle \cdot |j_2 m_2\rangle.$$

В этом случае имеется всего

$$N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$$

таких функций.

2) Набором собственных функций коммутирующих операторов

$$\hat{\mathbf{j}}^2, \hat{j}_z, \hat{\mathbf{j}}_1^2, \hat{\mathbf{j}}_2^2$$

с собственными значениями

$$j(j + 1), m, j_1(j_1 + 1), j_2(j_2 + 1).$$

Обозначим эти функции как

$$\Phi_{jm} = |jmj_1j_2\rangle.$$

При каждом j имеется $2j + 1$ различных значений

$$m = -j, -j + 1, \dots, j,$$

поэтому число таких функций (равное, конечно, N) есть

$$N = \sum_j (2j + 1),$$

где сумма берется по всем допустимым при данных j_1 и j_2 значениях j .

Функции $\Psi_{m_1 m_2}$ и Φ_{jm} должны быть снабжены также индексами j_1 и j_2 , но так как эти значения фиксированы, мы их для упрощения формул не выписываем явно.

Под проблемой сложения моментов понимаются следующие задачи:

а) какие значения m возможны при заданных m_1 и m_2 ?

б) какие значения j возможны при данных j_1 и j_2 ?

в) ясно, что любая функция Φ_{jm} может быть выражена через линейные комбинации функций $\Psi_{m_1 m_2}$, и наоборот:

$$\Phi_{jm} = \sum_{m_1 m_2} C_{m_1 m_2}^{jm} \Psi_{m_1 m_2}; \quad \Psi_{m_1 m_2} = \sum_{jm} \tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm} \Phi_{jm}.$$

Как найти коэффициенты C и \tilde{C} (их называют коэффициентами Клебша – Гордана)?

Сформулируем ответы на эти вопросы:

а) Так как $\hat{j}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}$, то

$$m = m_1 + m_2.$$

б) Величина j принимает $2j_1 + 1$ (при $j_2 > j_1$) или $2j_2 + 1$ (при $j_2 < j_1$) значений

$$j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2,$$

причем интервал значений j между наименьшим $j_{\min} = |j_1 - j_2|$ и наибольшим $j_{\max} = j_1 + j_2$ значениями таков, как если бы отрезки длиной j_1 , j_2 и j составляли треугольник.

в) Поскольку

$$C_{m_1 m_2}^{jm} = \langle \Psi_{m_1 m_2} | \Phi_{jm} \rangle, \quad \tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm} = \langle \Phi_{jm} | \Psi_{m_1 m_2} \rangle,$$

то

$$\tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm} = (C_{m_1 m_2}^{jm})^*.$$

Если выбрать коэффициенты $C_{m_1 m_2}^{jm}$ вещественными, то

$$\tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm} = C_{m_1 m_2}^{jm}.$$

Конструктивный способ нахождения коэффициентов Клебша – Гордана и доказательство ответа на вопрос б) мы укажем на двух простых примерах.

Пример 1 (сложение двух спинов):

$$j_1 = s_1 = 1/2, \quad j_2 = s_2 = 1/2, \quad \hat{\mathbf{j}} \equiv \hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2.$$

Имеется четыре функции:

$$\Psi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad \Psi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = |\uparrow\downarrow\rangle, \quad \Psi_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = |\downarrow\uparrow\rangle, \quad \Psi_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = |\downarrow\downarrow\rangle.$$

Так как $\max S = \max m = \max(m_1 + m_2) = 1$, то в нашей системе должен существовать триплет $S = 1, m = 1, 0, -1$, причем

$$\Phi_{11} = \Psi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = |\uparrow\uparrow\rangle.$$

Две остальные функции Φ_{10} и Φ_{1-1} могут быть получены действием понижающего оператора $\hat{S}_- = \hat{s}_{1-} + \hat{s}_{2-}$ на функцию Φ_{11} , что дает

$$\begin{aligned} \Phi_{10} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Psi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} + \Psi_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \right) = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}, \\ \Phi_{1-1} &= \Psi_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = |\downarrow\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

Оставшаяся ортогональная к Φ_{1m} комбинация $\Psi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} - \Psi_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$ имеет $S = \max(m) = 0$. Это синглет

$$\Phi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Psi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} - \Psi_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \right) = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Еще проще: состояния $|\uparrow\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\downarrow\rangle$ соответствуют $S = 1, m = \pm 1$ и симметричны по спинам. Симметрия функции не зависит от проекции момента. Поэтому симметричная (нормированная) функция с $m = 0$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

имеет $S = 1$, а ортогональная к ней антисимметричная функция

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

с $m = 0$ имеет $S = 0$.

Пример 2 (сложение орбитального и спинового моментов):

$$j_1 = l, \quad j_2 = s = \frac{1}{2}, \quad \hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}.$$

Имеется $(2l + 1) \cdot 2$ функций $\Psi_{m_1 m_2} = Y_{l m_1} \chi_{\frac{1}{2} m_2}$:

$$\underbrace{Y_{ll} \chi_+}_{m=l+\frac{1}{2}}, \underbrace{Y_{l, l-1} \chi_+, Y_{ll} \chi_-}_{m=l-\frac{1}{2}}, \dots, \underbrace{Y_{l, -l+1} \chi_-, Y_{l, -l} \chi_+}_{m=-l+\frac{1}{2}}, \underbrace{Y_{l, -l} \chi_-}_{m=-l-\frac{1}{2}},$$

где

$$\chi_+ = \chi_{\frac{1}{2} \frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- = \chi_{\frac{1}{2} -\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Так как $j_{\max} = \max(m_1 + m_2) = l + 1/2$, то существует мультиплет из $2j_{\max} + 1 = 2l + 2$ функций $\Phi_{l+\frac{1}{2}, m}$, причем

$$\Phi_{l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}} = Y_{ll} \chi_+ = \begin{pmatrix} Y_{ll} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Остальные функции этого мультиплета могут быть получены действием оператора $\hat{j}_- = \hat{l}_- + \hat{s}_-$. В частности,

$$\hat{j}_- \Phi_{l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}} = \sqrt{2l} Y_{l, l-1} \chi_+ + Y_{ll} \chi_- = \sqrt{2l+1} \Phi_{l+\frac{1}{2}, l-\frac{1}{2}}.$$

Из двух функций $\Psi_{m_1 m_2}$ с $m = l - 1/2$, помимо указанной выше комбинации, можно построить еще одну, ортогональную к $\Phi_{l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}}$:

$$Y_{l, l-1} \chi_+ - \sqrt{2l} Y_{ll} \chi_-.$$

Ясно, что эта комбинация принадлежит к мультиpletу с $j = \max(m_1 + m_2) = l - \frac{1}{2}$, содержащему $2j + 1 = 2l$ функцией $\Phi_{l-\frac{1}{2}, m}$. Таким образом, эти два мультиплета дают набор из $2l + 2 + 2l = (2l + 1) \cdot 2$ функций Φ_{jm} с $j = l + 1/2$ и $j = l - 1/2$.

Покажите, что

$$\Phi_{l+\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+m+1} & Y_{lm} \\ \sqrt{l-m} & Y_{l, m+1} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{l-\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l-m} & Y_{lm} \\ -\sqrt{l+m+1} & Y_{l, m+1} \end{pmatrix}.$$

Указание: первая из этих функций пропорциональна $\hat{\Pi} Y_{lm} \chi_+$, а вторая $(1 - \hat{\Pi}) Y_{lm} \chi_+$, где

$$\hat{\Pi} = \frac{1}{2l+1} \left[\left(\hat{l} + \hat{s} \right)^2 - \left(l - \frac{1}{2} \right) \left(l - \frac{1}{2} + 1 \right) \right] =$$

$$= \frac{1}{2l+1} \left(\hat{s}_- \hat{l}_+ + \hat{s}_+ \hat{l}_- + 2\hat{s}_z \hat{l}_z + l + 1 \right)$$

— проекционный оператор для мультиплета с $j = l + 1/2$.

§ 39. Правила отбора для матричных элементов скалярных и векторных операторов

Такие правила важны при расчете различных вероятностей переходов, в частности, при излучении и поглощении света атомами.

Скалярные величины не изменяются при поворотах, поэтому для каждого **скалярного** оператора \hat{S} , построенного из операторов \mathbf{r}^2 , $\hat{\mathbf{p}}^2$, \mathbf{gr} , \hat{l}^2 , $\hat{\mathbf{l}}\hat{\mathbf{s}}$ и т. д., справедливо соотношение

$$[\hat{\mathbf{J}}, \hat{S}] = 0$$

или

$$[\hat{J}_z, \hat{S}] = 0, \quad [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{S}] = 0,$$

где $\hat{\mathbf{J}}$ — оператор полного момента импульса системы. Пусть $|JM\alpha\rangle$ — собственная функция операторов $\hat{\mathbf{J}}^2$ и \hat{J}_z с собственными значениями $J(J+1)$ и M соответственно, набор квантовых чисел α характеризует другие возможные физические величины, имеющие определенные значения в этом состоянии. Из соотношения

$$\langle J'M'\alpha' | \hat{J}_z \hat{S} - \hat{S} \hat{J}_z | JM\alpha \rangle = (M' - M) \langle J'M'\alpha' | \hat{S} | JM\alpha \rangle = 0$$

следует, что матричный элемент $\langle J'M'\alpha' | \hat{S} | JM\alpha \rangle$ может быть отличен от нуля лишь при $M' = M$. Аналогично из соотношения

$$\langle J'M'\alpha' | [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{S}] | JM\alpha \rangle = 0$$

следует, что этот же матричный элемент может быть отличен от нуля лишь при $J' = J$.

Наконец, рассмотрим матричный элемент от операторного равенства $\hat{J}_- \hat{S} \hat{J}_+ = \hat{S} \hat{J}_- \hat{J}_+$ и учтем, что

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ | JM\alpha \rangle &= c | J, M+1, \alpha \rangle, \quad \langle JM\alpha' | \hat{J}_- = c \langle J, M+1, \alpha' |, \\ \hat{J}_- \hat{J}_+ | JM\alpha \rangle &= c^2 | JM\alpha \rangle, \end{aligned}$$

тогда получим

$$\langle J, M+1, \alpha' | \hat{S} | J, M+1, \alpha \rangle = \langle JM\alpha' | \hat{S} | JM\alpha \rangle.$$

Отсюда следует, что обсуждаемый матричный элемент вообще не зависит от M (при $M' = M$), т. е.

$$\langle J'M'\alpha' | \hat{S} | JM\alpha \rangle = f(J, \alpha, \alpha') \delta_{JJ'} \delta_{MM'}.$$

В качестве простого примера **векторного** оператора рассмотрим единичный вектор $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$. Известны соотношения между компонентами вектора \mathbf{n} и сферическими функциями $Y_{1m}(\theta, \varphi)$:

$$n_z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}, \quad n_{\pm} = n_x \pm i n_y = \mp \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1\pm 1}.$$

Отсюда ясно, что произведение $n_z | JM\alpha \rangle$ может быть представлено в виде суперпозиции функций Φ_{jm} с $m = M$ и $j = J-1, J, J+1$ при $J \geq 1$ и $j = 1/2, 3/2$ при $J = \frac{1}{2}$. Поэтому матричный элемент $\langle J'M'\alpha' | n_z | JM\alpha \rangle$ может быть отличен от нуля лишь при $M' = M$ и $J' = J, J \pm 1$ при $J \geq 1$ и $J' = 1/2, 3/2$ при $J = 1/2$. Аналогично для $\langle J'M'\alpha' | n_{\pm} | JM\alpha \rangle$ получим правила

отбора $M' = M \pm 1$ и те же правила отбора для J . Существенным для доказательства этих правил отбора был не конкретный вид оператора \mathbf{n} , а его векторный характер. Поэтому и для любого **векторного** оператора $\hat{\mathbf{V}}$ справедливы правила отбора: матричный элемент

$$\langle J'M'\alpha' | \hat{V}_z | JM\alpha \rangle$$

может быть отличен от нуля лишь при

$$M' = M,$$

матричный элемент

$$\langle J'M'\alpha' | \hat{V}_+ | JM\alpha \rangle$$

может быть отличен от нуля лишь при

$$M' = M + 1,$$

а матричный элемент

$$\langle J'M'\alpha' | \hat{V}_- | JM\alpha \rangle$$

может быть отличен от нуля лишь при

$$M' = M - 1,$$

и во всех этих случаях

$$J' = J - 1, J, J + 1 \text{ при } J \geq 1$$

или

$$J' = 1/2, 3/2 \text{ при } J = 1/2.$$

Найдите правила отбора по M для векторного оператора $\hat{\mathbf{V}}$, используя соотношение

$$[\hat{J}_z, \hat{V}_{\pm}] = \pm \hat{V}_{\pm},$$

следующее из $[\hat{J}_j, \hat{V}_k] = i\varepsilon_{jkn} \hat{V}_n$ (ср. формулу (23.12)).

Дополнительные правила отбора. Чётность состояния $\hat{\mathbf{V}} Y_{lm}$ равна $\mp(-1)^l$, если $\hat{\mathbf{V}}$ — полярный (аксиальный) вектор, поэтому $\langle l'm' | \hat{\mathbf{V}} | lm \rangle$ может быть отличен от нуля лишь при $l' = l \pm 1$ для полярного вектора (например, для $\mathbf{V} = \mathbf{r}$) и лишь при $l' = l$ для аксиального вектора (например, для $\hat{\mathbf{V}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}$).

§ 40. Усреднение векторного оператора

Полученные выше правила отбора позволяют получить важную в приложениях формулу усреднения произвольного векторного оператора по состояниям с определенными значениями операторов $\hat{\mathbf{J}}^2$ и \hat{J}_z .

Используя правила коммутации $[\hat{J}_j, \hat{V}_k] = i\varepsilon_{jkn} \hat{V}_n$, покажите, что

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 \left(\hat{\mathbf{J}}^2 \hat{\mathbf{V}} - \hat{\mathbf{V}} \hat{\mathbf{J}}^2 \right) - \left(\hat{\mathbf{J}}^2 \hat{\mathbf{V}} - \hat{\mathbf{V}} \hat{\mathbf{J}}^2 \right) \hat{\mathbf{J}}^2 &= \left[\hat{\mathbf{J}}^2, [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{V}}] \right] = \\ &= 2 \left(\hat{\mathbf{J}}^2 \hat{\mathbf{V}} + \hat{\mathbf{V}} \hat{\mathbf{J}}^2 \right) - 4\hat{\mathbf{J}} \left(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{V}} \right). \end{aligned}$$

Взяв от этого соотношения матричный элемент по состояниям $|JM'\alpha\rangle$ и $|JM\alpha\rangle$, отличающимся лишь значениями проекции \hat{J}_z , получим

$$J(J+1) \langle JM'\alpha | \hat{\mathbf{V}} | JM\alpha \rangle = \langle JM'\alpha | \hat{\mathbf{J}} \left(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{V}} \right) | JM\alpha \rangle.$$

В правой стороне этого равенства между операторами $\hat{\mathbf{J}}$ и $(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{V}})$ проложим полный набор

$$1 = \sum_{J''M''} |J''M''\alpha\rangle \cdot \langle J''M''\alpha|$$

и учтём выведенные в § 39 правила отбора. В итоге получим “формулу усреднения”

$$\langle JM'\alpha | \hat{\mathbf{V}} | JM\alpha \rangle = \frac{1}{J(J+1)} \langle JM'\alpha | \hat{\mathbf{J}} | JM\alpha \rangle \cdot \langle JM\alpha | \hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{V}} | JM\alpha \rangle,$$

показывающую, что усреднённый вектор \mathbf{V} направлен по усреднённому вектору \mathbf{J} . В частности, при $M' = M$ усреднённый вектор \mathbf{V} направлен по оси z :

$$\langle JM\alpha | \hat{\mathbf{V}} | JM\alpha \rangle = C \cdot (0, 0, M), \quad C = \frac{1}{J(J+1)} \langle JM\alpha | \hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{V}} | JM\alpha \rangle.$$

Задачи

40.1. Показать, что угловая волновая функция состояния $p_{1/2}$ (квантовые числа $l = 1, s = 1/2, j = 1/2$) может быть представлена в виде $(-\sigma\mathbf{n})\chi$, где \mathbf{n} — орт радиус-вектора, χ — обычный двухкомпонентный спинор.

40.2. Сложение моментов $\frac{1}{2} \times \frac{1}{2}, 1 \times 1, 1 \times \frac{1}{2}$ (в том числе с использованием таблиц коэффициентов Клебша – Гордана).

40.3. Найти среднее значение магнитного момента электрона в состоянии $p_{1/2}$ с $j_z = 1/2$ двумя способами:

а) используя результаты предыдущей задачи;

б) используя формулу усреднения векторного оператора.

40.4. Система состоит из двух спинов $s_1 = s_2 = 1/2$, взаимодействие которых имеет вид $\hat{V} = K\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2$. Найти уровни энергии системы во внешнем магнитном поле \mathbf{B} , если гироманнитные отношения равны g_1 и g_2 .

40.5. Найти правила отбора для матричных элементов дипольного $\langle l'm' | x_j | lm \rangle$ и квадрупольного $\langle l'm' | x_j x_k - \frac{1}{3} \delta_{ij} r^2 | lm \rangle$ моментов.

40.6. Найти в борновском приближении сечение рассеяния быстрых нейтронов кулоновским полем (Задача 13.43 из [4], а

также § 42 из книги Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский А. П. Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1989)).

Глава VIII

РЕЛЯТИВИСТСКАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Мы начнём эту главу разделом, посвящённым принципу Паули, который, на первый взгляд, не связан прямо с релятивистской проблематикой. Но этот принцип окажется весьма полезным при обсуждении свойств релятивистского уравнения Дирака, поэтому удобно рассмотреть его до изложения этого уравнения.

§ 41. Тожественность частиц. Принцип Паули

Благодаря отсутствию точной локализуемости в квантовой механике тождественность частиц приводит к их неразличимости. Пусть

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_i, \dots, x_k, \dots, x_N)$$

— волновая функция системы N одинаковых частиц, а x_j — совокупность координат и спиновых переменных j -ой частицы. В квантовой механике **постулируется, что эта волновая функция и волновая функция с переставленными частицами**

$$\psi(x_1, x_2, \dots, x_k, \dots, x_i, \dots, x_N)$$

ОПИСЫВАЮТ ОДНО И ТО ЖЕ СОСТОЯНИЕ. Для простоты рассмотрим случай двух одинаковых частиц, их волновая функция $\psi(x_1, x_2)$ отличается от волновой функции с переставленными частицами $\psi(x_2, x_1)$ лишь фазовым множителем

$$\psi(x_2, x_1) = e^{i\alpha} \psi(x_1, x_2).$$

Так как двухкратная перестановка двух частиц — тождественная операция, то $(e^{i\alpha})^2 = 1$, и потому

$$\psi(x_2, x_1) = \pm \psi(x_1, x_2).$$

Двум возможным знакам \pm в этом соотношении отвечают два разных рода частиц — *бозоны* и *фермионы*, при этом волновая функция *бозонов симметрична*, а волновая функция *фермионов антисимметрична* относительно перестановки двух каких-либо частиц. Благодаря принципу суперпозиции симметрия всех состояний физической системы одинакова.

Для двух невзаимодействующих бозонов симметричная волновая функция имеет вид

$$\psi(x_1, x_2) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) + \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)], & a \neq b \\ \psi_a(x_1)\psi_b(x_2), & a = b, \end{cases}$$

Для двух невзаимодействующих фермионов антисимметричная волновая функция имеет вид

$$\psi(x_1, x_2) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)], & a \neq b \\ 0, & a = b. \end{cases}$$

Отсюда следует принцип Паули: **два фермиона не могут находиться в одном и том же квантовом состоянии.**

Электроны, протоны, нейтроны, нейтрино, мюоны имеют спин $1/2$ и являются фермионами. Фотоны и переносчики слабого взаимодействия W^\pm и Z^0 частицы имеют спин 1 и являются бозонами.

В релятивистской квантовой теории поля доказывается теорема Паули о связи спина со статистикой: **частицы с целым спином — бозоны, частицы с полуцелым спином — фермионы.**

Принцип Паули обеспечивает стабильность атома — системы электронов (частиц со спином $1/2$).

Составная частица, построенная из чётного числа фермионов — бозон, из нечётного числа фермионов — фермион. Так, атом He^4 имеет в своем составе чётное число фермионов (два электрона в электронной оболочке, два протона и два нейтрона в ядре) и является бозоном, в то время как атом He^3 имеет в своем составе нечётное число фермионов (два электрона в электронной оболочке, два протона и один нейтрон в ядре) и является фермионом. Это приводит, в частности, к резкому различию свойств жидкого He^4 и He^3 в области низких температур.

§ 42. Уравнение Клейна – Фока – Гордона

В релятивистской теории операторы

$$\hat{p}_0 = \frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{и} \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$$

образуют 4-мерный вектор

$$\hat{p}^\mu = i\hbar \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla \right) = i\hbar \partial^\mu.$$

Уравнение Шредингера

$$c\hat{p}_0 \Psi(\mathbf{r}, t) = \left\{ \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\phi \right\} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

и уравнение Паули (см. § 24)

$$c\hat{p}_0 \Psi(\mathbf{r}, t) = \left\{ \frac{1}{2m} \left(\boldsymbol{\sigma} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right)^2 + e\phi \right\} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

не являются релятивистски-инвариантными, компоненты \hat{p}_μ входят в них явно несимметричным образом: эти уравнения линейны по оператору \hat{p}_0 и квадратичны по $\hat{\mathbf{p}}$. Простейшее релятивистское обобщение уравнения Шрёдингера можно получить, потребовав, чтобы в него входила вторая степень оператора \hat{p}_0 .

Из классического соотношения для компонент 4-импульса релятивистской частицы⁶

$$\left(p - \frac{e}{c}A\right)^\mu \left(p - \frac{e}{c}A\right)_\mu = m^2 c^2,$$

где $A^\mu = (A_0(\mathbf{r}, t), \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))$ — 4-потенциал электромагнитного поля и $A_0(\mathbf{r}, t) \equiv \phi(\mathbf{r}, t)$ — скалярный потенциал, при замене $p_0 \rightarrow i(\hbar/c)(\partial/\partial t)$, $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$ возникает релятивистское волновое уравнение Клейна – Фока – Гордона (1926–1927)

$$\left[\left(i \frac{\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{e}{c} A_0 \right)^2 - \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = m^2 c^2 \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (42.1)$$

Свободному движению частицы с определенным 4-импульсом $p^\mu = (E/c, \mathbf{p})$ соответствует плоская волна

$$\Psi(x) = A e^{-i(Et - \mathbf{p}\mathbf{r})/\hbar}.$$

Если подставить эту функцию в уравнение (1) с $A_\mu = 0$, то найдем естественную связь между энергией и импульсом

$$E^2 = m^2 c^4 + \mathbf{p}^2 c^2,$$

которой соответствует закон дисперсии, т. е. зависимость энергии от импульса, вида

$$E = \pm c \sqrt{m^2 c^2 + \mathbf{p}^2}.$$

⁶В этой главе по повторяющимся индексам 4-векторов подразумевается суммирование, т. е. выражение $A^\mu B_\mu$ означает

$$A^\mu B_\mu \equiv A_0 B_0 - A_x B_x - A_y B_y - A_z B_z = A_0 B_0 - \mathbf{A}\mathbf{B}.$$

Отложим обсуждение двух возможных знаков \pm в этом выражении до § 47.

Релятивистское уравнение КФГ оказалось уравнением второго порядка по времени. Это приводит к следующему принципиальному отличию от нерелятивистской квантовой механики, основанной на уравнении Шрёдингера — уравнении первого порядка по времени. Одним из постулатов квантовой механики является интерпретация квадрата модуля волновой функции как плотности вероятности $\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$. Эта плотность вероятности и плотность тока вероятности

$$\mathbf{j} = \frac{1}{2m} \Psi^* \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \Psi + \text{комп. сопр.}$$

связаны уравнением непрерывности

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \mathbf{j} = 0,$$

из которого следует, что условие нормировки $\int \rho(\mathbf{r}, t) d^3r = 1$ не изменяется с течением времени.

Подобная интерпретация невозможна для волновой функции уравнения КФГ, так как для неё интеграл $\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$ не сохраняется с течением времени. Естественным релятивистским обобщением 3-вектора \mathbf{j} является 4-вектор

$$j_\mu = \left\{ \Psi^* \left(i\hbar\partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) \Psi + \left(i\hbar\partial_\mu \Psi - \frac{e}{c} A_\mu \Psi \right)^* \cdot \Psi \right\}.$$

Легко проверить, используя уравнение КФГ, что компоненты этого 4-вектора удовлетворяют уравнению непрерывности. Это означает, что роль плотности вероятности должна играть нулевая компонента 4-вектора j_μ , т. е.

$$\rho = \frac{j_0}{c} = \frac{1}{c} \left\{ \Psi^* \left(i\hbar\partial_0 - \frac{e}{c} A_0 \right) \Psi + \left(i\hbar\partial_0 \Psi - \frac{e}{c} A_0 \Psi \right)^* \cdot \Psi \right\}.$$

Однако эта величина не является положительно определённой! В квантовой теории поля показывается, что 4-вектор j_μ играет

роль не плотности тока вероятности, но плотности тока заряженных частиц, а в этом случае j_0 может быть отрицательной величиной.

Уравнение КФГ и 4-вектор j_μ инвариантны относительно калибровочного преобразования

$$A_\mu \rightarrow A_\mu - \partial_\mu f, \quad \Psi \rightarrow \Psi e^{ief/(\hbar c)}, \quad (42.2)$$

где f — произвольная функция координат и времени.

Обсудим нерелятивистский предел $\mathbf{p}^2 \ll m^2 c^2$. В этом случае

$$E = mc^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{(\mathbf{p}^2)^2}{8m^3 c^2} + \dots$$

Рассмотрим движение нерелятивистской частицы в потенциальном поле $U(r)$. Релятивистская поправка к нерелятивистскому оператору Гамильтона

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(r)$$

возникает из-за изменения закона дисперсии. Соответствующее возмущение равно

$$\hat{V} = -\frac{(\hat{\mathbf{p}}^2)^2}{8m^3 c^2}.$$

В кулоновской задаче (при $U(r) = -e^2/r$) эта поправка снимает вырождение по l в спектре и приводит к **тонкой структуре уровней**. Возникающая поправка к энергии

$$\Delta E_{nl} = \langle nl | \hat{V} | nl \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \left\langle nl \left| \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \right)^2 \right| nl \right\rangle$$

может быть переписана с учетом

$$\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} = \hat{H}_0 + \frac{e^2}{r}, \quad \hat{H}_0 |nl\rangle = E_n |nl\rangle$$

в виде (см. (13.1) и (27.1))

$$\begin{aligned} \Delta E_{nl} &= -\frac{1}{2mc^2} \left\langle nl \left| \left(E_n + \frac{e^2}{r} \right)^2 \right| nl \right\rangle = \\ &= -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{\alpha^2}{n^3} \left(\frac{1}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4n} \right). \end{aligned} \quad (42.3)$$

Здесь

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

— безразмерная константа, *постоянная тонкой структуры*.

$$\begin{array}{l} \left. \begin{array}{l} 2 \\ l = 1 \\ 0 \end{array} \right\} n = 3 \\ \left. \begin{array}{l} 1 \\ l = 0 \end{array} \right\} n = 2 \\ \left. \begin{array}{l} 0 \end{array} \right\} n = 1 \end{array}$$

Тонкая структура уровней атома водорода согласно (3)

Однако реальный спектр атома водорода отличается от этого спектра. Причина в том, что уравнение (1) не учитывает спин электрона.

§ 43. Симметричная форма уравнения Дирака

В нерелятивистской квантовой механике спин электрона учитывается в уравнении Паули (см. (37.1), (37.2)), которое мы

представим в форме

$$\left\{ \sigma_0 (c\hat{p}_0 - eA_0) - \frac{1}{2m} \left[\boldsymbol{\sigma} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right]^2 \right\} \Psi(\mathbf{r}, t) = 0,$$

где σ_0 — единичная матрица. Естественное релятивистское обобщение уравнения Паули выглядит так:

$$\left\{ \left[\gamma_0 \left(\hat{p}_0 - \frac{e}{c} A_0 \right) - \boldsymbol{\gamma} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right]^2 - m^2 c^2 \right\} \Psi(x) = 0, \quad (43.1)$$

где $\gamma^\mu = (\gamma_0, \boldsymbol{\gamma})$ — некоторые матрицы, а $x = (ct, \mathbf{r})$ — 4-радиус-вектор. Представим оператор второго порядка $\{\dots\}$ в левой части уравнения (1) в факторизованном виде

$$\{\dots\} = \left[\gamma^\mu \left(i\hbar \partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) + mc \right] \left[\gamma^\nu \left(i\hbar \partial_\nu - \frac{e}{c} A_\nu \right) - mc \right].$$

Функция $\Psi(x)$ удовлетворяет уравнению (1), если она является решением уравнения первого порядка

$$\left[\gamma^\mu \left(i\hbar \partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) - mc \right] \Psi(x) = 0. \quad (43.2)$$

Это и есть *уравнение Дирака* (1928). Для свободной частицы уравнение Дирака имеет вид

$$(\gamma^\mu \hat{p}_\mu - mc) \Psi(x) = 0. \quad (43.3)$$

Конечно, все предыдущее не вывод, а лишь наводящие соображения. Мы постулируем уравнение Дирака в виде (2), а справедливость его подтверждается соответствием следствий из него эксперименту.

Отметим сразу же основное свойство матриц γ^μ . Решение уравнения Дирака для свободной частицы (3) удовлетворяет также уравнению (1) (при $A_\mu = 0$), которое мы перепишем в форме

$$(\gamma^\mu \hat{p}_\mu + mc) (\gamma^\nu \hat{p}_\nu - mc) \Psi(x) = 0. \quad (43.4)$$

Чтобы сохранить обычную связь между энергией и импульсом, $E^2 = (\mathbf{p}^2 + m^2 c^2) c^2$, естественно потребовать, чтобы уравнение (4) совпадало с уравнением Клейна – Фока – Гордона $(\hat{p}^\mu \hat{p}_\mu - m^2 c^2) \Psi(x) = 0$. Отсюда следует, что

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} I. \quad (43.5)$$

Сколько компонент у волновой функции $\Psi(x)$? При выяснении этого вопроса важную роль играет инвариантность уравнения Дирака относительно отражений пространственных осей или P -инвариантность.

При повороте на угол θ вокруг оси \mathbf{n} преобразование 2-компонентного спинора φ имеет вид (36.2)

$$\varphi' = \exp\left(\frac{i}{2} \theta \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}\right) \varphi = [\cos(\theta/2) + i \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \sin(\theta/2)] \varphi. \quad (43.6)$$

Оператор поворота $\exp\left(\frac{i}{2} \theta \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}\right)$ не нарушает P -инвариантность, так как и спин (собственный момент импульса электрона) $\hat{\mathbf{s}} = \boldsymbol{\sigma}/2$, и ось поворота \mathbf{n} — аксиальные векторы, а потому произведение $\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}$ — истинный скаляр, не изменяющий знак при отражении координат.

Преобразование Лоренца вдоль оси x со скоростью V имеет вид

$$\begin{aligned} x' &= x \operatorname{ch} \theta - ct \operatorname{sh} \theta, & ct' &= ct \operatorname{ch} \theta - x \operatorname{sh} \theta, \\ \operatorname{ch} \theta &= \frac{1}{\sqrt{1 - (V/c)^2}}, & \operatorname{sh} \theta &= \frac{(V/c)}{\sqrt{1 - (V/c)^2}} \end{aligned}$$

и соответствует гиперболическому повороту в плоскости x, ct , а соответствующее преобразование спинора может быть получено заменой $\theta \rightarrow i\theta$ в уравнении (6), что даёт

$$\varphi' = \exp\left(-\frac{1}{2} \theta \sigma_x\right) \varphi,$$

где быстрота θ определяется соотношением $\operatorname{th} \theta = V/c$. В случае преобразования Лоренца, задаваемого произвольным вектором

скорости \mathbf{V} , имеем:

$$\varphi' = \exp\left(-\frac{1}{2}\theta\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}\right)\varphi = [\operatorname{ch}(\theta/2) - \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}\operatorname{sh}(\theta/2)]\varphi, \quad (43.7)$$

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{V}}{V}, \quad \operatorname{th}\theta = \frac{V}{c}.$$

Оператор $\exp\left(-\frac{1}{2}\theta\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}\right)$ нарушает P -инвариантность, так как скорость $\mathbf{V} = V\mathbf{n}$ — полярный вектор, и, следовательно, $\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}$ — псевдоскаляр, изменяющий знак при отражении координат.

Поэтому для сохранения P -инвариантности приходится вводить второй спинор χ с иным, чем у φ , поведением при отражении координат. Если

$$\hat{P}\varphi(t, \mathbf{r}) = \eta_P\varphi(t, -\mathbf{r}), \quad \hat{P}\chi(t, \mathbf{r}) = -\eta_P\chi(t, -\mathbf{r}), \quad (43.8)$$

где η_P — фазовый множитель, то преобразование вида

$$\begin{aligned} \varphi' &= \varphi \operatorname{ch}(\theta/2) - \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}\chi \operatorname{sh}(\theta/2), \\ \chi' &= \chi \operatorname{ch}(\theta/2) - \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}\varphi \operatorname{sh}(\theta/2) \end{aligned} \quad (43.9)$$

сохраняет P -инвариантность. Двухкомпонентные спиноры φ и χ объединяются в 4-компонентный спинор, или биспинор

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \varphi(x) \\ \chi(x) \end{pmatrix},$$

для которого преобразование (6), соответствующее повороту, имеет вид

$$\Psi' = \exp\left(\frac{i}{2}\theta\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{n}\right)\Psi = [\cos(\theta/2) + i\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{n}\sin(\theta/2)]\Psi, \quad (43.10)$$

а формула (9), соответствующая преобразованию Лоренца, имеет вид

$$\Psi' = \exp\left(-\frac{1}{2}\theta\boldsymbol{\alpha}\mathbf{n}\right)\Psi = [\operatorname{ch}(\theta/2) - \boldsymbol{\alpha}\mathbf{n}\operatorname{sh}(\theta/2)]\Psi, \quad (43.11)$$

где матрицы

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad (43.12)$$

эрмитовы и удовлетворяют соотношениям

$$\Sigma_j\Sigma_k = I\delta_{jk} + i\varepsilon_{jkn}\Sigma_n, \quad \alpha_j\alpha_k + \alpha_k\alpha_j = 2I\delta_{jk}. \quad (43.13)$$

Преобразование (8), соответствующее отражению пространственных координат, может быть записано в виде

$$\begin{aligned} \Psi^P(x) &\equiv \hat{P}\Psi(t, \mathbf{r}) = \eta_P U_P \Psi(t, -\mathbf{r}), \\ U_P &= U_P^{-1} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (43.14)$$

Найдем 4×4 матрицы γ_μ , рассматривая для простоты уравнение Дирака для свободной частицы (3). При отражении координат оператор \hat{p}_0 не изменяется, а оператор $\hat{\mathbf{p}}$ изменяет знак. Если в уравнении Дирака $(\gamma_0\hat{p}_0 - \boldsymbol{\gamma}\hat{\mathbf{p}} - mc)\Psi(t, \mathbf{r}) = 0$ провести замены $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow -\hat{\mathbf{p}}$, $\Psi(t, \mathbf{r}) \rightarrow \Psi(t, -\mathbf{r}) = \eta_P^{-1}U_P\Psi^P(x)$, соответствующие P -отражению, то получим уравнение

$$(\gamma_0\hat{p}_0 + \boldsymbol{\gamma}\hat{\mathbf{p}} - mc)U_P\Psi^P(x) = 0.$$

Таким образом, чтобы функция $\Psi^P(x)$ удовлетворяла тому же уравнению, что и функция $\Psi(x)$, матрицы γ_μ должны удовлетворять условиям

$$U_P\gamma_0 = \gamma_0U_P, \quad U_P\boldsymbol{\gamma} = -\boldsymbol{\gamma}U_P.$$

Ясно поэтому, что можно выбрать

$$\gamma_0 = U_P = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}.$$

Из $U_P\boldsymbol{\gamma} + \boldsymbol{\gamma}U_P = 0$ следует, что

$$\boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & 0 \end{pmatrix},$$

а соотношение

$$\gamma_m\gamma_n + \gamma_n\gamma_m = -2\delta_{mn}I; \quad m, n = x, y, z$$

удовлетворяется, если выбрать $B_n = -C_n = \sigma_n$, где σ_n — матрицы Паули. Тогда

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}. \quad (43.15)$$

Этот выбор соответствует так называемому *стандартному представлению*. Существуют другие представления матриц Дирака, которые получаются из стандартного с помощью преобразования $\gamma_\mu \rightarrow U\gamma_\mu U^{-1}$, где U — унитарная матрица.

§ 44. Релятивистская ковариантность уравнения Дирака

Пусть при произвольном преобразовании Лоренца 4-радиус вектор x_μ преобразуется по закону

$$x'_\mu = \Lambda_{\mu\nu} x^\nu,$$

а соответствующее преобразование биспинора Дирака задается матрицей U :

$$\Psi'(x') = U \Psi(x).$$

Чтобы доказать релятивистскую ковариантность уравнения Дирака, достаточно показать, что найденные выше операторы γ_μ преобразуются как 4-векторы, т. е. преобразованный оператор $U^{-1}\gamma_\mu U$ удовлетворяет соотношению (ср. с обсуждением преобразования оператора $\boldsymbol{\sigma}$ относительно поворотов в § 36.3)

$$U^{-1}\gamma_\mu U = \Lambda_{\mu\nu} \gamma^\nu. \quad (44.1)$$

Это легко проверить непосредственно для поворотов (43.10), когда $U = \exp\left(\frac{i}{2}\boldsymbol{\theta}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{n}\right)$, и для простого преобразования Лоренца (43.11), когда $U = \exp\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{\theta}\boldsymbol{\alpha}\mathbf{n}\right)$. При этом оказываются полезными соотношения

$$\boldsymbol{\Sigma} \gamma_0 = \gamma_0 \boldsymbol{\Sigma}, \quad \boldsymbol{\alpha} \gamma_0 = -\gamma_0 \boldsymbol{\alpha} = -\boldsymbol{\gamma}, \quad (44.2)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_j \gamma_k &= \begin{cases} -\gamma_k \Sigma_j = i\varepsilon_{jkl} \gamma_l & \text{при } j \neq k \\ -\gamma_k \Sigma_j & \text{при } j = k, \end{cases} \\ \alpha_j \gamma_k &= \begin{cases} \gamma_k \alpha_j & \text{при } j \neq k \\ -\gamma_0 & \text{при } j = k. \end{cases} \end{aligned}$$

Значит, уравнение (1) справедливо и для общего случая, который всегда можно рассматривать как комбинацию этих двух простых преобразований.

Назовем функцию

$$\bar{\Psi}(x) \equiv \Psi^+(x)\gamma_0 \quad (44.3)$$

дираковски сопряжённой функции $\Psi(x)$. Она преобразуется по закону

$$\bar{\Psi}' = \Psi^+ U^+ \gamma_0,$$

причем для поворотов (43.10) и для простого преобразования Лоренца (43.11) из (2) следует, что

$$U^+ \gamma_0 = \gamma_0 U^{-1}.$$

Значит, и в общем случае дираковски сопряжённая функция преобразуется по закону

$$\bar{\Psi}' = \bar{\Psi} U^{-1}, \quad (44.4)$$

откуда видно, что величина $\bar{\Psi} \Psi$ преобразуется по закону

$$\bar{\Psi}' \Psi' = \bar{\Psi} \Psi, \quad (44.5)$$

т. е. является скаляром, а величина $\bar{\Psi} \gamma_\mu \Psi$ преобразуется по закону

$$\bar{\Psi}' \gamma_\mu \Psi' = \Lambda_{\mu\nu} \bar{\Psi} \gamma^\nu \Psi, \quad (44.6)$$

т. е. является 4-вектором. Аналогично можно показать, что величина $\bar{\Psi} \gamma_\mu \gamma_\nu \Psi$ является 4-тензором второго ранга, а величины $\bar{\Psi} \gamma_5 \Psi$ и $\bar{\Psi} \gamma_5 \gamma_\mu \Psi$, где

$$\gamma_5 = -i\gamma_0 \gamma_x \gamma_y \gamma_z = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ -I & 0 \end{pmatrix}, \quad (44.7)$$

преобразуются как псевдоскаляр и аксиальный 4-вектор соответственно.

§ 45. Плотность тока. Зарядовое сопряжение. Отражение времени

Дираковски сопряжённая функция удовлетворяет уравнению

$$\left(-i\hbar\partial_\mu - \frac{e}{c}A_\mu\right) \bar{\Psi}(x) \gamma^\mu - mc\bar{\Psi}(x) = 0. \quad (45.1)$$

Домножим это уравнение справа на $\Psi(x)$ и вычтем из уравнения (43.2), домноженного слева на $\bar{\Psi}(x)$, тогда получим уравнение

$$(\partial_\mu \bar{\Psi}(x)) \gamma^\mu \Psi(x) + \bar{\Psi}(x) \gamma^\mu \partial_\mu \Psi(x) = 0,$$

которое можно переписать в виде закона сохранения 4-мерного тока. Если ввести *4-мерную плотность тока*

$$j_\mu(x) = c\bar{\Psi}(x) \gamma_\mu \Psi(x), \quad (45.2)$$

то она будет удовлетворять уравнению непрерывности

$$\partial_\mu j^\mu(x) = 0. \quad (45.3)$$

Для дираковской частицы плотность вероятности

$$\rho(x) = j_0(x)/c = \bar{\Psi}(x)\gamma_0\Psi(x) = \Psi^+(x)\Psi(x) \quad (45.4)$$

является положительно определённой функцией, а плотность 3-мерного тока равна

$$\mathbf{j}(x) = c\bar{\Psi}(x) \boldsymbol{\gamma}\Psi(x) = c\Psi^+(x)\boldsymbol{\alpha}\Psi(x), \quad (45.5)$$

где эрмитовы матрицы $\boldsymbol{\alpha} = \gamma_0\boldsymbol{\gamma}$ определены в (43.12). Уравнение Дирака и плотность дираковского тока, разумеется, инвариантны относительно калибровочного преобразования (42.2).

Рассмотрим еще свойства уравнения Дирака относительно C (зарядовое сопряжение) и T (отражение времени) преобразований. Если функция $\Psi(x)$ удовлетворяет уравнению (43.2), то легко проверить, что функция

$$\Psi^C(x) = C\bar{\Psi}(x), \quad C = \gamma_y\gamma_0 = -\alpha_y \quad (45.6)$$

соответствует зарядово-сопряжённой частице, т. е. удовлетворяет уравнению

$$\left[\gamma^\mu \left(i\hbar\partial_\mu + \frac{e}{c}A_\mu\right) - mc\right] \Psi^C(x) = 0, \quad (45.7)$$

которое отличается от уравнения (43.2) для $\Psi(x)$ лишь знаком заряда e . Аналогично, если функция $\Psi(x)$ удовлетворяет уравнению (43.3), то легко проверить, что функция

$$\Psi^T(t, \mathbf{r}) = U_T\bar{\Psi}(-t, \mathbf{r}), \quad U_T = i\gamma_z\gamma_x\gamma_0 \quad (45.8)$$

удовлетворяет тому же уравнению. Наконец, укажем, что действие трёх преобразований C , P и T определяется соотношением

$$\Psi^{CPT}(t, \mathbf{r}) = i\gamma_5\Psi(-t, -\mathbf{r}), \quad (45.9)$$

где матрица γ_5 определена в (44.7).

§ 46. Гамильтонова форма уравнения Дирака

Умножив уравнение (43.2) на γ_0 слева, получим уравнение Дирака в гамильтоновой форме:

$$i\hbar \frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi, \quad \hat{H} = \boldsymbol{\alpha}(c\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}) + mc^2\gamma_0 + eA_0, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla. \quad (46.1)$$

Отсюда оператор скорости равен

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \mathbf{r}] = c\boldsymbol{\alpha}, \quad (46.2)$$

а операторное уравнение движения во внешнем поле

$$\frac{d}{dt} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) = e\mathcal{E} + e\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{B}$$

является аналогом классического уравнения движения

$$\frac{d}{dt} \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - (\mathbf{v}/c)^2}} = e\mathcal{E} + e\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{B}.$$

В центральном поле (при $\mathbf{A} = 0$, $eA_0 = U(r)$) орбитальный момент $\hat{\mathbf{I}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}$ и спин

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}$$

в отдельности не сохраняются:

$$\frac{d\hat{\mathbf{I}}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{I}}] = \frac{c}{\hbar} \boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}, \quad \frac{d\hat{\mathbf{s}}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{s}}] = -\frac{c}{\hbar} \boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}.$$

Естественно, однако, что сохраняется полный момент $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{s}}$,

$$\frac{d\hat{\mathbf{j}}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{j}}] = 0.$$

Рассмотрим теперь свободный электрон в состоянии с определенным импульсом \mathbf{p} . В этом случае гамильтониан

$$\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + mc^2\gamma_0$$

также, вообще говоря, не коммутирует с оператором спина:

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{s}}] = i c \boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{p}. \quad (46.3)$$

Однако последняя формула подсказывает два возможных исключения.

1. Если $\mathbf{p} \rightarrow 0$ (что справедливо в системе покоя электрона), то правая часть уравнения (3) обращается в нуль

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{s}}] = 0 \quad \text{при} \quad \mathbf{p} \rightarrow 0. \quad (46.4)$$

Таким образом, спиновое состояние свободного электрона можно описывать, задавая определенное значение $\sigma = \pm 1/2$ оператора \hat{s}_z в системе покоя электрона.

2. Если умножить уравнение (3) скалярно на вектор \mathbf{p} , то правая часть полученного соотношения также обратится в нуль. Поэтому оператор *спиральности* $\hat{\Lambda}$ (проекции спина на направление импульса электрона) коммутирует с гамильтонианом

$$[\hat{H}, \hat{\Lambda}] = 0, \quad \hat{\Lambda} = \hat{\mathbf{s}} \cdot \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}. \quad (46.5)$$

Собственные значения оператора $\hat{\Lambda}$ равны $\lambda = \pm 1/2$, а его собственные состояния называются *спиральными состояниями*.

Задачи

46.1. Указать релятивистские единицы энергии, времени, длины, силы.

46.2. Используя тождество $\langle n | [\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}\mathbf{r}] | n \rangle = 0$, где

$$\hat{H} = \boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + \gamma_0 m - \frac{Ze^2}{r},$$

показать, что энергия $E_n = \langle n | \gamma_0 | n \rangle$.

46.3. Найти уровни энергии электрона в однородном постоянном магнитном поле.

§ 47. Свободное движение дираковской частицы

Свободному движению частицы с определенным 4-импульсом $p^\mu = (E, \mathbf{p})$ соответствует плоская волна⁷

$$\Psi(x) = u(p) e^{-ip_\mu x^\mu}, \quad p_\mu x^\mu = Et - \mathbf{p}\mathbf{r},$$

⁷Здесь и ниже в § 48–49 (за исключением § 48.1) полагаем $\hbar = 1$, $c = 1$.

где биспинор $u(\mathbf{p})$ удовлетворяет системе алгебраических уравнений

$$(\gamma_\mu p^\mu - m) u(\mathbf{p}) = 0.$$

Для двухкомпонентных спиноров $\varphi(\mathbf{p})$ и $\chi(\mathbf{p})$, через которые выражается биспинор

$$u(\mathbf{p}) = \begin{pmatrix} \varphi(\mathbf{p}) \\ \chi(\mathbf{p}) \end{pmatrix},$$

получаем систему уравнений

$$(E - m)\varphi - \boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\chi = 0, \quad \boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}\varphi - (E + m)\chi = 0.$$

Эта система имеет ненулевое решение, если ее определитель равен нулю, т. е. если

$$E^2 = \mathbf{p}^2 + m^2.$$

Введем арифметический, положительный корень

$$\varepsilon = +\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}.$$

Существуют две возможности (рис. 27):

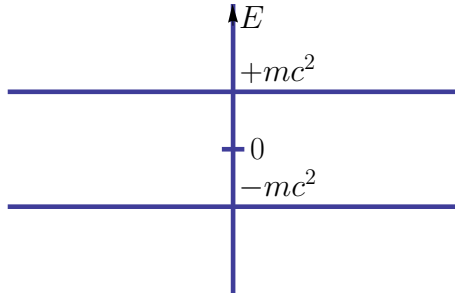


Рис. 27. Возможные значения энергии для свободной дираковской частицы: $E = +\sqrt{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2} > mc^2$ и $E = -\sqrt{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2} < -mc^2$. Дираковской щели соответствует область энергий: $-mc^2 < E < mc^2$

1. Энергия положительна:

$$E = +\varepsilon, \quad \chi = \frac{\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}}{\varepsilon + m} \varphi.$$

При нормировке

$$\varphi^+ \varphi = 1, \quad u^+ u = 1$$

получаем биспинор

$$u(\varepsilon, \mathbf{p}) \equiv u_{\mathbf{p}} = \sqrt{\frac{\varepsilon + m}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} \varphi \\ \hat{A} \varphi \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = \frac{\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}}{\varepsilon + m} \quad (47.1)$$

2. Энергия отрицательна:

$$E = -\varepsilon, \quad u(-\varepsilon, \mathbf{p}) = \sqrt{\frac{\varepsilon + m}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} -\hat{A} \chi \\ \chi \end{pmatrix}.$$

Четыре компоненты волновой функции соответствуют двум возможным ориентациям спина при двух возможных знаках энергии. Исключить состояния с отрицательной энергией нельзя, так как в квантовой механике возможны переходы между состояниями. Дирак постулировал, что уровни с отрицательной энергией заполнены. Тогда переходов на них нет в силу принципа Паули. Дырка в дираковском море ведет себя как частица той же массы, что и электрон, но с противоположным зарядом, причём отсутствующему электрону с энергией $(-\varepsilon)$ и импульсом $(-\mathbf{p})$ соответствует частица-дырка с энергией $(+\varepsilon)$ и импульсом $(+\mathbf{p})$. В квантовой теории поля частица-дырка выступает как античастица, а представление о дираковском море оказалось излишним. Такая античастица для электрона была вскоре обнаружена (К. Андерсон, 1932) и названа *позитроном*.

Таким образом, свободному электрону соответствует плоская волна

$$\Psi_p(x) = u_{\mathbf{p}} e^{-ip_\mu x^\mu}, \quad p_\mu x^\mu = \varepsilon t - \mathbf{p}\mathbf{r}, \quad (47.2)$$

где биспинор $u_{\mathbf{p}}$ определен в (1), а свободному позитрону соответствует плоская волна

$$\Psi_{-p}(x) = C \bar{\Psi}_p(x) = v_{\mathbf{p}} e^{ip_\mu x^\mu}, \quad p_\mu x^\mu = \varepsilon t - \mathbf{p}\mathbf{r}, \quad (47.3)$$

где биспинор $v_{\mathbf{p}}$ определен соотношением

$$v_{\mathbf{p}} \equiv u(-\varepsilon, -\mathbf{p}) = C \bar{u}_{\mathbf{p}} = \sqrt{\frac{\varepsilon + m}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} \hat{A} \chi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (47.4)$$

$$\chi = -\sigma_y \varphi, \quad v_{\mathbf{p}}^+ v_{\mathbf{p}} = 1.$$

Отметим, что этот результат находится в соответствии с формулами зарядового сопряжения (см. (45.6), (45.7)) : если функция $\Psi(x) \propto e^{-i\varepsilon t/\hbar}$ есть решение стационарного уравнения Дирака для частицы с энергией $E = +\varepsilon$ и зарядом e во внешнем поле, то функция $C\bar{\Psi}(x) \propto e^{+i\varepsilon t/\hbar}$ отвечает решению уравнения Дирака для частицы с энергией $E = -\varepsilon$ и противоположным зарядом $(-e)$ в том же поле. Биспиноры $u_{\mathbf{p}}$ и $v_{\mathbf{p}}$ взаимно ортогональны

$$v_{\mathbf{p}}^+ u_{\mathbf{p}} = u_{\mathbf{p}}^+ v_{\mathbf{p}} = 0.$$

В нерелятивистском пределе величина $\hat{A} \sim |\mathbf{p}|/m \ll 1$, поэтому волновая функция свободного электрона (позитрона) фактически становится двухкомпонентной, так как её нижние (верхние) компоненты оказываются $\sim |\mathbf{p}|/m$.

Отметим также особенность, связанную с оператором скорости $\hat{\mathbf{v}} = \boldsymbol{\alpha}$. Так как $\hat{v}_x = \alpha_x$, а $\alpha_x^2 = I$, то собственные значения оператора \hat{v}_x равны ± 1 (или $\pm c$ в обычных единицах). Однако собственные функции оператора \hat{v}_x не соответствуют определенному знаку энергии, т. е. обычным физическим состояниям. И наоборот, среднее значение скорости в состоянии с фиксированной энергией

$$\langle v_x \rangle = u^+(\pm\varepsilon, \mathbf{p}) \alpha_x u(\pm\varepsilon, \mathbf{p}) = \frac{p_x}{\pm\varepsilon},$$

как и должно быть.

Спиновые состояния электрона и позитрона задаются двухкомпонентным спинором φ . Классификация этих состояний мо-

жет быть проведена двумя возможными способами, описанными в § 46. Электрону с проекцией спина на ось z в его системе покоя, равной σ , соответствуют спиноры

$$\varphi^{(\sigma=1/2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \varphi^{(\sigma=-1/2)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (47.5)$$

а электрону со спиральностью λ — спиноры (см. § 36.3)

$$\varphi^{(\lambda=1/2)}(\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (47.6a)$$

$$\varphi^{(\lambda=-1/2)}(\mathbf{n}) = \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad (47.6b)$$

где единичный вектор \mathbf{n} определяется направлением импульса электрона

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta). \quad (47.7)$$

Задачи

47.1. Найти решение уравнения Дирака для плоской волны, используя преобразование Лоренца из системы покоя электрона.

47.2. Найти решение уравнения Дирака в виде плоской волны для частицы с массой $m = 0$.

§ 48. Нерелятивистский и ультрарелятивистский пределы уравнения Дирака

При рассмотрении нерелятивистского и ультрарелятивистского пределов уравнения Дирака удобно использовать это

уравнение в гамильтоновой форме (46.1) с определенной релятивистской энергией ε ,

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}), \quad \psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi(\mathbf{r}) \\ \chi(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (48.1)$$

и переписать его в виде системы связанных уравнений для двухкомпонентных спиноров $\varphi(\mathbf{r})$ и $\chi(\mathbf{r})$:

$$(\varepsilon - mc^2 - eA_0)\varphi(\mathbf{r}) = c\boldsymbol{\sigma} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \chi(\mathbf{r}), \quad (48.2a)$$

$$(\varepsilon + mc^2 - eA_0)\chi(\mathbf{r}) = c\boldsymbol{\sigma} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \varphi(\mathbf{r}). \quad (48.2b)$$

48.1. Нерелятивистский предел уравнения Дирака

Проведем разложение уравнения Дирака (2) по степеням v/c до первого порядка включительно (разложение до второго порядка см. в § 51). Для этого введём нерелятивистскую энергию

$$E_{\text{нер}} = \varepsilon - mc^2$$

и будем предполагать, что $|E_{\text{нер}}| \ll mc^2$ и $|eA_0| \ll mc^2$. Тогда из уравнения (2b) в первом порядке по v/c находим

$$\chi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \varphi(\mathbf{r}).$$

Подставляя это выражение в (2a), получаем

$$(E_{\text{нер}} - eA_0)\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \left[\boldsymbol{\sigma} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right) \right]^2 \varphi(\mathbf{r}).$$

С учетом (37.2) это уравнение принимает вид уравнения Паули:

$$\hat{H}_{\text{нер}}\varphi(\mathbf{r}) = E_{\text{нер}}\varphi(\mathbf{r}), \quad \hat{H}_{\text{нер}} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \right)^2 + eA_0 - \hat{\boldsymbol{\mu}}_e \mathbf{B},$$

в котором значение магнитного момента электрона

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_e = \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma}$$

получено как простое следствие уравнения Дирака.

48.2. Ультрарелятивистский предел уравнения Дирака

Рассмотрим ультрарелятивистский предел уравнения Дирака (1), (2), когда при $\varepsilon \gg mc^2$ в гамильтониане можно пренебречь слагаемым, пропорциональным массе электрона, т. е. когда

$$\hat{H} = \boldsymbol{\alpha}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}) + eA_0. \quad (48.3)$$

В этом случае решения уравнения Дирака обладают дополнительной симметрией. Чтобы увидеть это, перепишем (2), пренебрегая массой электрона,

$$(\varepsilon - eA_0)\varphi(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})\chi(\mathbf{r}),$$

$$(\varepsilon - eA_0)\chi(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})\varphi(\mathbf{r}).$$

Складывая и вычитая эти два уравнения, получим систему несвязанных уравнений:

$$\boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})\xi(x) = +(\varepsilon - eA_0)\xi(x),$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})\eta(x) = -(\varepsilon - eA_0)\eta(x),$$

где новые двухкомпонентные спиноры ξ и η выражаются линейно через старые:

$$\xi = \frac{1}{2}(\varphi + \chi), \quad \eta = \frac{1}{2}(\varphi - \chi).$$

Видно, что новые спиноры ξ и η являются собственными функциями оператора

$$\hat{K} = (\varepsilon - eA_0)^{-1} \boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})$$

с собственными значениями $+1$ и -1 соответственно. Таким образом, спиноры ξ и η описывают два разных квантовых состояния, которые являются решениями уравнения Дирака с одной и той же энергией ε . Состояние, описываемое спинором $\xi(x)$, называется *киральным состоянием с положительной (или правой)*,

R) киральностью, а состояние, описываемое спинором $\eta(x)$, называется киральным состоянием с отрицательной (или левой, L) киральностью.

При свободном движении дираковской частицы, когда 4-потенциал $A_\mu = 0$, оператор $\hat{K} = \boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}}/\varepsilon$ лишь множителем 2 отличается от оператора спиральности $\hat{\Lambda} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \hat{\mathbf{p}}/|\mathbf{p}|$, так как в ультррелятивистском пределе $|\mathbf{p}| = \varepsilon$. Поэтому правым или левым киральным состояниям соответствуют определенные значения спиральности $\lambda = +1/2$ или $\lambda = -1/2$. В квазиклассическом приближении оператору $\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}$ соответствует вектор $m\mathbf{v}/\sqrt{1-v^2}$, а оператору $\varepsilon - eA_0$ — величина $m/\sqrt{1-v^2}$, так что оператору \hat{K} и в этом случае соответствует определенная проекция спина на направление движения частицы.

В обычном формализме четырехкомпонентных спиноров $\psi(\mathbf{r})$ дополнительная симметрия уравнения Дирака при $m = 0$ связана с наличием дополнительного интеграла движения. Соответствующим ему оператором является величина (см. (44.7))

$$\gamma_5 = -i\gamma_0\gamma_x\gamma_y\gamma_z = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ -I & 0 \end{pmatrix}$$

со свойствами

$$(\gamma_5)^2 = 1, \quad \gamma_5\gamma_\mu + \gamma_\mu\gamma_5 = 0, \quad \gamma_5\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}\gamma_5 = 0.$$

Из первого уравнения следует, что собственные значения γ_5 равны ± 1 , а из второго и третьего уравнений следует, что γ_5 не коммутирует с полным гамильтонианом

$$\hat{H} = \boldsymbol{\alpha}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}) + eA_0 + m\gamma_0,$$

содержащим слагаемое $m\gamma_0$, но коммутирует с гамильтонианом (3), в котором это слагаемое отсутствует. Поэтому мы можем ставить задачу на поиск совместных собственных функций опе-

раторов \hat{H} (3) и γ_5 . Пусть $\psi(\mathbf{r})$ есть некоторое решение уравнения $\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r})$. Легко проверить, что функции

$$\psi_R(\mathbf{r}) = \frac{1 - \gamma_5}{2}\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \xi(\mathbf{r}) \\ \xi(\mathbf{r}) \end{pmatrix},$$

$$\psi_L(\mathbf{r}) = \frac{1 + \gamma_5}{2}\psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \eta(\mathbf{r}) \\ -\eta(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$$

являются собственными функциями γ_5 :

$$\gamma_5\psi_{R,L}(\mathbf{r}) = \mp\psi_{R,L}(\mathbf{r}).$$

Из эксперимента следует, что масса нейтрино очень мала, и что обычно нейтрино можно считать с хорошей точностью левым, а антинейтрино — правым. Во взаимодействиях нейтрино чётность не сохраняется.

§ 49. Сходство и различие уравнений Дирака и Клейна – Фока – Гордона

Применив оператор $\gamma^\mu(i\partial_\mu - eA_\mu) + m$ к уравнению Дирака, квадривируем это уравнение:

$$\{(i\partial_\mu - eA_\mu)(i\partial^\mu - eA^\mu) - \frac{ie}{2}\gamma^\mu\gamma^\nu F_{\mu\nu} - m^2\}\Psi(x) = 0, \quad (49.1)$$

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu.$$

Отличие этого уравнения от уравнения Клейна – Фока – Гордона во втором спиновом слагаемом.

Рассмотрим движение заряженной частицы в постоянном (но не обязательно однородном) магнитном поле $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ в отсутствие электрического поля. В этом случае спиновое слагаемое принимает форму

$$-\frac{ie}{2}\gamma^\mu\gamma^\nu F_{\mu\nu} = e\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{B}.$$

Для стационарного решения $\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi_E(\mathbf{r}) e^{-iEt}$ в силу уравнения (1) получаем:

$$\{(E^2 - (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})^2 + e\Sigma\mathbf{B} - m^2)\} \psi_E(\mathbf{r}) = 0.$$

Так как

$$(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})^2 - e\Sigma\mathbf{B} = (2\hat{\mathbf{s}}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}))^2,$$

где $\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}\Sigma$ — оператор спина электрона, то мы приходим к выводу, что в этом случае состояние с определённой энергией $\psi_E(\mathbf{r})$ одновременно является состоянием с определённым значением оператора $(2\hat{\mathbf{s}}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}))^2$ с собственным значением $E^2 - m^2$. Поэтому скалярное произведение

$$\hat{\mathbf{s}}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})$$

также имеет в данном состоянии определённое значение $\pm \frac{1}{2}\sqrt{E^2 - m^2}$.

В квазиклассическом приближении величина $\mathbf{p} - e\mathbf{A}$ совпадает с $m\mathbf{v}/\sqrt{1 - v^2}$, а модуль этой величины сохраняется в магнитном поле, не зависящем от времени. Таким образом, из сохранения величин \mathbf{sv} и $|\mathbf{v}|$ следует, что в постоянном магнитном поле сохраняется величина $\lambda = \mathbf{sv}/|\mathbf{v}|$, т. е. спиральность электрона (проекция спина электрона на направление его движения).

В действительности это утверждение нарушается за счет малого аномального магнитного момента электрона. Магнитный момент электрона равен (в обычных единицах)

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc}(1 + \kappa), \quad \kappa \approx \frac{\alpha}{2\pi} \ll 1.$$

Эту поправку можно учесть, модифицировав уравнение Дирака следующим образом:

$$\left[\gamma^\mu (i\partial_\mu - eA_\mu) - m - \frac{ie\kappa}{4m} \gamma^\mu \gamma^\nu F_{\mu\nu} \right] \Psi(x) = 0.$$

§ 50. Рассеяние релятивистского электрона в кулоновском поле

Пусть релятивистский электрон рассеивается в кулоновском поле протона ($-e^2/r$), переходя из начального состояния

$$\psi_i(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}}$$

с импульсом \mathbf{p} и энергией $\varepsilon = \sqrt{m^2 + \mathbf{p}^2}$ в конечное состояние

$$\psi_f(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{p}'} e^{i\mathbf{p}'\mathbf{r}}$$

с импульсом \mathbf{p}' и той же энергией ε . Здесь четырехкомпонентные спиноры $u_{\mathbf{p}}$ и $u_{\mathbf{p}'}$ определены через обычные двухкомпонентные спиноры φ_i и φ_f соответственно (см. § 47):

$$u_{\mathbf{p}} = \sqrt{\frac{\varepsilon + m}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} \varphi_i \\ \hat{A} \varphi_i \end{pmatrix}, \quad u_{\mathbf{p}'} = \sqrt{\frac{\varepsilon + m}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} \varphi_f \\ \hat{A}' \varphi_f \end{pmatrix},$$

$$\hat{A} = \frac{\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}}{\varepsilon + m}, \quad \hat{A}' = \frac{\boldsymbol{\sigma}\mathbf{p}'}{\varepsilon + m}.$$

Борновская амплитуда рассеяния⁸

$$f = -\frac{\varepsilon}{2\pi} U_{fi}$$

с точностью до множителя равна фурье-образу потенциала взаимодействия, или матричному элементу

$$\begin{aligned} U_{fi} &= U(\mathbf{q}) = \int \psi_f^+(\mathbf{r}) \left(-\frac{e^2}{r} \right) \psi_i(\mathbf{r}) d^3r = -\frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2} u_{\mathbf{p}'}^+ u_{\mathbf{p}} = \\ &= -\frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2} \varphi_f^+ \left\{ 1 - \frac{\mathbf{q}^2}{4\varepsilon(\varepsilon + m)} + \frac{i[\mathbf{p}' \times \mathbf{p}]\boldsymbol{\sigma}}{2\varepsilon(\varepsilon + m)} \right\} \varphi_i, \quad \mathbf{q} = \mathbf{p}' - \mathbf{p}. \end{aligned}$$

Выражение в фигурных скобках перепишем в виде

$$\left\{ 1 - \frac{\mathbf{q}^2}{4\varepsilon(\varepsilon + m)} + \frac{i[\mathbf{p}' \times \mathbf{p}]\boldsymbol{\sigma}}{2\varepsilon(\varepsilon + m)} \right\} = A + i\mathbf{n}\boldsymbol{\sigma} B, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{p}' \times \mathbf{p}}{|\mathbf{p}' \times \mathbf{p}|},$$

⁸Такое релятивистское обобщение формул § 33 может быть получено с помощью нестационарной теории возмущений (см. ниже § 63).

где \mathbf{n} — нормаль к плоскости рассеяния. Если выбрать \mathbf{n} в качестве оси квантования спина (оси z), то

$$\varphi_f^+ (A + i \mathbf{n} \boldsymbol{\sigma} B) \varphi_i \neq 0,$$

только если начальные и конечные проекции спинов на эту ось совпадают, $m_i = m_f$. Это делает тривиальным усреднение сечения по поляризациям начального электрона и суммирование по поляризациям конечного электрона, так что

$$\frac{1}{2} \sum_{m_i, m_f} \left| \varphi_f^+ (A + i \mathbf{n} \boldsymbol{\sigma} B) \varphi_i \right|^2 = A^2 + B^2 = 1 - \frac{v^2}{c^2} \sin^2(\theta/2),$$

где θ — угол рассеяния. В итоге сечение рассеяния равно (в обычных единицах)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{e^4 c^4}{4\varepsilon^2 v^4 \sin^4(\theta/2)} \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \sin^2(\theta/2) \right).$$

§ 51. Тонкая структура уровней атома водорода

Если ограничиться в выражении для матричного элемента первой релятивистской поправкой, положив в ней $\varepsilon = mc^2$, то получим

$$U(\mathbf{q}) \approx -\frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2} + \pi \frac{e^2 \hbar^2}{c^2} \left\{ \frac{1}{2m^2} - \frac{i[\mathbf{q} \times \mathbf{p}]\boldsymbol{\sigma}}{\hbar m^2 \mathbf{q}^2} \right\}$$

(опускаем для краткости φ_f^+ и φ_i). Отличия фурье-образа этой величины⁹, равного

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{r} + \frac{e^2 \hbar^2}{m^2 c^2} \left\{ \frac{\pi}{2} \delta(\mathbf{r}) + \frac{\mathbf{l}\boldsymbol{\sigma}}{4r^3} \right\},$$

от кулоновской потенциальной энергии ($-e^2/r$) составляют релятивистскую поправку к взаимодействию электрона с ядром:

$$\hat{V}_1 = \frac{e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2 r^3} \mathbf{l}\boldsymbol{\sigma} + \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \delta(\mathbf{r}).$$

Первое спин-орбитальное слагаемое в этой поправке можно качественно интерпретировать как взаимодействие магнитного момента электрона $\boldsymbol{\mu} = e_e \hbar \boldsymbol{\sigma} / (2mc)$ в его собственной системе с магнитным полем $\mathbf{B} = -(\mathbf{v}/c) \times \mathcal{E}$, возникающим в этой системе из-за движения электрона в электрическом поле ядра $\mathcal{E} = e_p \mathbf{r} / r^3$ (здесь e_p и $e_e = -e_p$ — заряд протона и электрона). Второе δ -функциональное слагаемое в поправке также имеет спиновое происхождение и является чисто квантовым.

Учитывая найденную ранее поправку

$$\hat{V}_2 = -\frac{(\hat{\mathbf{p}}^2)^2}{8m^3 c^2}$$

к зависимости энергии от импульса (см. § 42), получаем следующее выражение для релятивистского возмущения в кулоновской задаче:

$$\hat{V} = \hat{V}_1 + \hat{V}_2 = -\frac{(\hat{\mathbf{p}}^2)^2}{8m^3 c^2} + \frac{e^2 \hbar^2}{4m^2 c^2 r^3} \hat{\mathbf{l}}\boldsymbol{\sigma} + \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \delta(\mathbf{r}). \quad (51.1)$$

⁹При вычислении фурье-образа используем интегралы:

$$\int \frac{4\pi}{\mathbf{q}^2} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} = \frac{1}{r}, \quad \frac{\mathbf{r}}{r^3} = -\nabla \frac{1}{r} = -\int \frac{4\pi i \mathbf{q}}{\mathbf{q}^2} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3},$$

$$\int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} = \delta(\mathbf{r}).$$

Состояния с одним и тем же l , но с разными полными моментами j не смешиваются этим возмущением, поскольку оно сохраняет полный момент. Состояния с одним и тем же j , но с разными $l = j \pm \frac{1}{2}$ не смешиваются возмущением \hat{V} , поскольку оно сохраняет чётность, а чётность таких состояний противоположна. Таким образом, при вычислении релятивистской поправки к энергии можно пользоваться теорией возмущений без вырождения.

Среднее значение первого слагаемого было вычислено при рассмотрении аналогичной задачи для уравнения Клейна – Фокка – Гордона (см. § 42).

Среднее значение второго слагаемого отлично от нуля лишь при $l = 0$:

$$\langle njl | \delta(\mathbf{r}) | njl \rangle = |\psi(0)|^2 \delta_{l0}.$$

Среднее значение последнего слагаемого отлично от нуля лишь при $l \neq 0$:

$$\left\langle njl \left| \frac{\hat{\mathbf{l}} \boldsymbol{\sigma}}{r^3} \right| njl \right\rangle = \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \cdot (1 - \delta_{l0}).$$

$$\begin{array}{l} \text{-----} \quad 3d_{5/2} \\ \text{-----} \quad 3p_{3/2}, 3d_{3/2} \\ \text{-----} \quad 3s_{1/2}, 3p_{1/2} \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} 3d_{5/2} \\ 3p_{3/2}, 3d_{3/2} \\ 3s_{1/2}, 3p_{1/2} \end{array}} \right\} n = 3$$

$$\begin{array}{l} \text{-----} \quad 2p_{3/2} \\ \text{-----} \quad 2s_{1/2}, 2p_{1/2} \end{array} \left. \vphantom{\begin{array}{l} 2p_{3/2} \\ 2s_{1/2}, 2p_{1/2} \end{array}} \right\} n = 2$$

$$\text{-----} \quad 2s_{1/2} \quad \left. \vphantom{2s_{1/2}} \right\} n = 1$$

Тонкая структура уровней атома водорода согласно уравнению Дирака

Величины $|\psi(0)|^2$ и $\langle 1/r^3 \rangle$ удобно вычислить, воспользовавшись тождеством

$$\langle njl | \hat{C} | njl \rangle = 0, \quad \hat{C} = \left[\frac{d}{dr}, \hat{H}_r \right],$$

где

$$\hat{H}_r = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - \frac{e^2}{r}$$

— гамильтониан радиального движения. Явное вычисление коммутатора даёт

$$\hat{C} = \frac{\hbar^2}{mr^2} \frac{d}{dr} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2}.$$

Первое слагаемое в правой части можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \right\rangle &= \int d\Omega \int_0^\infty \psi^* \frac{1}{r^2} \frac{d\psi}{dr} r^2 dr = \\ &= \frac{1}{2} \int d\Omega \int_0^\infty \frac{d|\psi|^2}{dr} dr = -2\pi |\psi(0)|^2. \end{aligned}$$

Напомним, что $\psi(0) \neq 0$ лишь для $l = 0$. Таким образом, из тождества $\langle njl | \hat{C} | njl \rangle = 0$ находим

$$\frac{2\pi\hbar^2}{m} |\psi(0)|^2 \delta_{l0} + \left\langle \frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr^3} \right\rangle (1 - \delta_{l0}) = \left\langle \frac{e^2}{r^2} \right\rangle$$

или (с учетом найденного ранее (см. (27.1)) значения $\langle 1/r^2 \rangle$)

$$\langle njl | \delta(\mathbf{r}) | njl \rangle = |\psi(0)|^2 = \frac{1}{\pi a_{\text{B}}^3 n^3} \delta_{l0},$$

$$\left\langle njl \left| \frac{1}{r^3} \right| njl \right\rangle = \frac{1}{a_{\text{B}}^3 n^3 l(l+1)(l+1/2)} (1 - \delta_{l0}).$$

В итоге поправка к энергии равна

$$\Delta E_{nj} = -\frac{me^4 \alpha^2}{2\hbar^2 n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (51.2)$$

Видно, что сохраняется вырождение уровней с одинаковыми n и j , но разными l .

Задачи

51.1. Найти расщепление α -линии серии Бальмера (переход с уровня $n = 3$ на уровень $n = 2$) с учетом тонкой структуры для уравнения Клейна – Фока – Гордона и уравнения Дирака.

51.2. Оценить с помощью соотношения неопределенности критическое значение Z_c заряда точечного ядра, при котором в релятивистской кулоновской задаче возникает падение на центр.

51.3. Пусть два точечных ядра с зарядами Z_1 и Z_2 находятся на расстоянии R друг от друга. При этом $Z_1 < Z_c$, $Z_2 < Z_c$, $Z_1 + Z_2 > Z_c$. Оценить, при каком R в задаче возникает падение на центр.

§ 52. Рождение электрон-позитронных пар постоянным электрическим полем

Рождение электрон-позитронных пар внешним электрическим полем — замечательное предсказание релятивистской квантовой механики (Заутер, 1931; Швингер, 1951). Напряженности электрического поля, достаточно большие для реального наблюдения эффекта, достигаются в столкновениях атомных ядер с большими зарядами при сближении ядер на малые расстояния. Мы рассмотрим модель явления, допускающую точное решение, — случай однородного постоянного внешнего поля \mathcal{E} . Будет использовано представление о дираковском море, это резко упрощает решение задачи.

Начнем с расчета основной, экспоненциальной зависимости эффекта. Направим ось z вдоль постоянной силы $\mathbf{F} = -e\mathcal{E} = (0, 0, e\mathcal{E})$, тогда потенциальная энергия $U = -e\mathcal{E}z$ (в этом параграфе e обозначает элементарный заряд, так что заряд электрона равен $(-e)$). При движении в таком поле сохраняется

полная энергия $E = \pm\sqrt{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2} - e\mathcal{E}z$ и поперечный импульс $\mathbf{p}_\perp = (p_x, p_y, 0)$. В этом поле обычная дираковская щель (рис. 12) перекашивается (рис. 28). В результате электрон, который имел отрицательную энергию в отсутствие поля, может

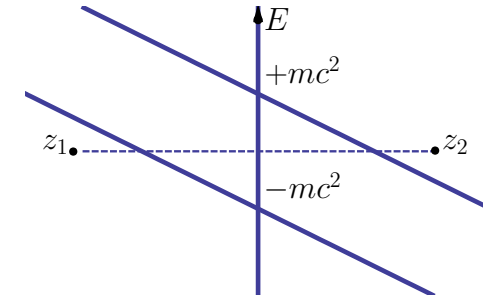


Рис. 28. Изменение дираковской щели при наличии постоянного электрического поля

теперь протуннелировать сквозь щель (см. пунктирную линию на рис. 28) и уйти на бесконечность как обычная частица. Конечно, дырка, возникшая таким образом, — это не что иное, как позитрон.

Пусть $E = -\sqrt{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2} - e\mathcal{E}z$ — энергия частицы дираковского моря. Продольный импульс частицы

$$p_z(z) = \frac{1}{c} \sqrt{(e\mathcal{E}z + E)^2 - m^2c^4 - \mathbf{p}_\perp^2c^2}$$

обращается в нуль при

$$z_{1,2} = \frac{-E}{e\mathcal{E}} \mp \frac{\sqrt{m^2c^4 + \mathbf{p}_\perp^2c^2}}{e\mathcal{E}}.$$

Исходная частица из дираковского моря входит в барьер в точке $z = z_1$ и выходит из него при $z = z_2$. Подбарьерное действие легко находится:

$$S = \int_{z_1}^{z_2} |p(z)| dz = \frac{\pi}{2} \frac{(m^2c^4 + \mathbf{p}_\perp^2c^2)c}{e\mathcal{E}}.$$

В итоге экспоненциальный фактор в вероятности W подбарьерного перехода таков:

$$W \sim e^{-2S/\hbar} = \exp \left[-\frac{\pi (m^2 c^2 + \mathbf{p}_\perp^2) c}{e \mathcal{E} \hbar} \right]. \quad (52.1)$$

Заметим, что внешнее поле можно считать постоянным, если оно слабо меняется на подбарьерном пути. Отношение l/λ_e длины этого пути $l = z_2 - z_1 \sim mc^2/(eE)$ к комптоновской длине волны электрона $\lambda_e = \hbar/(mc)$ равно по порядку величины подбарьерному действию S в единицах \hbar , так что в квазиклассической ситуации $l \gg \lambda_e$.

Вычислим теперь предэкспоненциальный фактор в вероятности рождения пар. Экспонента (1) — это вероятность того, что одна частица из дираковского моря, которая подходит слева к барьеру (см. рис. 28), протуннелирует сквозь него, став, таким образом, реальным электроном. Рассмотрим исходные частицы в элементе импульсного пространства $d^3p = d^2p_\perp dp_z$, плотность которых равна

$$dn = 2 \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3},$$

где множитель 2 соответствует двум возможным проекциям спина электрона. В единицу времени через площадку $dx dy$ слева от барьера пройдет

$$d\dot{N} = dj_z(z) dx dy$$

частиц, где ток

$$dj_z(z) = v_z(z) dn.$$

В это выражение входит величина

$$v_z(z) dp_z = \frac{\partial E}{\partial p_z} dp_z = dE,$$

где частная производная берется при фиксированных значениях z и \mathbf{p}_\perp . С другой стороны, как нетрудно сообразить, интервал энергий туннелирующих частиц dE прямо связан с интервалом dz продольных координат точек, в которых частицы входят в барьер: $dE = e\mathcal{E} dz$ (с точностью до несущественного здесь знака). Чтобы получить полное число пар, рожденных в единицу времени в объеме $dV = dx dy dz$, экспоненту (1) следует домножить на $d\dot{N}$. В итоге полное число пар, рожденных в единицу времени в единице объема, равно

$$P_{1/2} \equiv \frac{dW}{dt dV} = 2 e \mathcal{E} \int \frac{d^2 p_\perp}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left[-\frac{\pi (m^2 c^2 + \mathbf{p}_\perp^2) c}{e \mathcal{E} \hbar} \right].$$

Интегрируя это выражение по поперечным импульсам, находим окончательный ответ:

$$P_{1/2} = \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{4\pi^3 \hbar^2 c} \exp \left(-\frac{\pi \mathcal{E}_0}{\mathcal{E}} \right), \quad \mathcal{E}_0 = \frac{m^2 c^3}{e \hbar}. \quad (52.2)$$

Мы снабдили вероятности P в формулах, полученных выше, индексом $1/2$, чтобы подчеркнуть, что результат относится к частицам со спином половина. Разумеется, понятие моря Дирака, а с ним и наш подход, неприменимы сами по себе к рождению пар заряженных бесспиновых частиц, которые описываются уравнением Клейна – Фока – Гордона. Но в используемом квазиклассическом приближении вероятности рождения частиц разного спина отличаются лишь числом спиновых состояний. Таким образом, вероятность рождения скалярных частиц, вычисленная в этом приближении, вдвое меньше:

$$P_0 = \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{8\pi^3 \hbar^2 c} \exp \left(-\frac{\pi \mathcal{E}_0}{\mathcal{E}} \right). \quad (52.3)$$

Соответствующие точные результаты для постоянного элек-

трического поля таковы:

$$P_{1/2} = \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{4\pi^3 \hbar^2 c} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \exp\left(-n \frac{\pi \mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}\right),$$

$$P_0 = \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{8\pi^3 \hbar^2 c} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n^2} \exp\left(-n \frac{\pi \mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}\right).$$

Разумеется, учет высших членов, с $n \geq 2$, в этих суммах осмыслен лишь для очень сильных электрических полей, при $\mathcal{E} \gtrsim \mathcal{E}_0$. Для меньших полей формулы (2) и (3) верны количественно.

Задача

52.1. Чему равно (в эВ/см) критическое поле $\mathcal{E}_0 = m^2 c^3 / (e \hbar)$, при котором исчезает экспоненциальное подавление рождения пар внешним полем?

Глава IX

АТОМ

§ 53. Оценка для атома гелия

При описании состояния сложного атома используются различные приближенные методы. Мы начнем с простых оценок для атома гелия, гамильтониан которого без учета релятивистских поправок имеет вид

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}.$$

Оценим с помощью соотношения неопределенностей энергию основного состояния атома гелия. Естественно принять импульсы обоих электронов равными $p_1 = p_2$, а радиус-векторы равными и противоположными по направлению, $\mathbf{r}_1 = -\mathbf{r}_2$.

Тогда для энергии получаем следующую оценку:

$$E \sim \frac{p^2}{m} - \frac{7e^2}{2r}.$$

Минимизируя это выражение с учетом соотношения неопределенностей, находим:

$$E_{\min} \sim -\frac{49}{8} \text{ Ry} = -6,1 \text{ Ry}.$$

Это не так далеко от экспериментального значения

$$E_{\text{exp}} = -5,808 \text{ Ry}.$$

§ 54. Вариационный принцип

54.1. Идея метода

Уравнение Шредингера $\hat{H}\psi = E\psi$ может быть получено из условия минимума функционала

$$\int \psi^*(\hat{H} - E)\psi dx.$$

Иначе это можно сформулировать как условие минимума функционала

$$\int \psi^* \hat{H} \psi dx$$

при дополнительном условии

$$\int \psi^* \psi dx = 1,$$

которое учитывается с помощью лагранжева множителя E .

Волновая функция основного состояния ψ_0 соответствует абсолютному минимуму функционала. Волновую функцию первого возбужденного состояния ψ_1 следует искать на классе функций, ортогональных ψ_0 . Волновая функция второго возбужденного состояния ψ_2 должна быть ортогональна ψ_0 и ψ_1 , и т. д.

54.2. Прямой вариационный метод

Этот метод состоит в отыскании минимума функционала

$$E(\beta) = \int \psi^*(x, \beta) \hat{H} \psi(x, \beta) dx$$

на классе пробных функций заданного вида $\psi(x, \beta)$, зависящих от параметров β , и сводится фактически к отысканию минимума функции $E(\beta)$. Найденное таким образом приближенное значение E лежит, очевидно, не ниже истинного E_0 .

Поясним сказанное следующим. Пусть $\psi_n(x)$ и E_n — точные собственные функции и собственные значения гамильтониана \hat{H} , т. е.

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

Разложим пробную функцию $\psi(x, \beta)$ по этим собственным функциям

$$\psi(x, \beta) = \sum_n c_n(\beta) \psi_n(x).$$

Используя это разложение, мы получим

$$E(\beta) = \sum_n E_n |c_n(\beta)|^2.$$

Коэффициенты $c_n(\beta)$ в силу условия нормировки удовлетворяют соотношению

$$\sum_n |c_n(\beta)|^2 = 1.$$

Выразим отсюда величину

$$|c_0(\beta)|^2 = 1 - \sum_{n>0} |c_n(\beta)|^2$$

и перепишем выражение для средней энергии в виде

$$E(\beta) = E_0 + \sum_{n>0} (E_n - E_0) |c_n(\beta)|^2.$$

Отсюда видно, что $E(\beta) \geq E_0$ и что $E(\beta) = E_0$, только если $c_n(\beta) = \delta_{n0}$.

Найдем прямым вариационным методом энергию основного состояния гелиеподобного иона с зарядом ядра Ze . Гамильтониан системы (без учета релятивистских поправок) имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (54.1)$$

Нормированную пробную функцию выберем в виде

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2), \quad \psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\beta^3}{\pi a_B^3}} e^{-\beta r/a_B},$$

где $\psi(\mathbf{r})$ соответствует волновой функции основного состояния водородоподобного атома с зарядом ядра βe . Иными словами, точную волновую функцию системы двух взаимодействующих электронов в поле ядра с зарядом Ze мы приближенно заменили волновой функцией, соответствующей двум невзаимодействующим электронам в поле ядра с зарядом βe . Следует ожидать, что вариационный параметр β , имеющий смысл эффективного заряда, окажется меньше Z вследствие экранировки одним из электронов поля ядра для другого электрона. Вычисление (см. [1], задача 1 к § 69) даёт

$$E(\beta) = 2 \left(\beta^2 - 2Z\beta + \frac{5}{8}\beta \right) \text{Ry}.$$

Минимум этой функции

$$E_0 = -2 \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2 \text{Ry}$$

достигается при

$$\beta = Z - \frac{5}{16}.$$

Для гелия ($Z = 2$) получаем $E_0 = -5,695 \text{ Ry}$. Превышение над истинным значением ($E_0 = -5.808 \text{ Ry}$) всего 1,9 %.

Задачи

54.1*. Укажите классический аналог обсуждаемого вариационного принципа.

54.2. Найти по теории возмущений поправку к энергии атома He за счет взаимодействия электронов для состояний: $1s^2$, $2s^2$, $1snl$, $1s2s$.

§ 55. Самосогласованное поле (метод Хартри – Фока)

В этом методе для нахождения волновых функций применяется вариационный принцип с учетом правильной симметрии волновых функций (Фок, 1930). Поясним суть этого метода на примере двухэлектронной задачи с гамильтонианом (54.1). Этот гамильтониан не зависит от спинов электронов, поэтому полная волновая функция системы может быть представлена в виде произведения спиновой и координатной функций:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \chi(\sigma_1, \sigma_2). \quad (55.1)$$

Полная волновая функция $\psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2)$ должна быть антисимметрична относительно перестановки координат и спиновых переменных электронов. Так как спиновая функция $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$ является симметричной (антисимметричной) для полного спина $S = 1$ ($S = 0$), то координатная функция $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ должна быть соответственно антисимметричной или симметричной для триплетного ($S = 1$) или синглетного ($S = 0$) состояний. При этом дополнительно предполагается, что можно приближенно описывать состояния одного электрона как независимой частицы в некотором эффективном поле ядра, частично экранированного вторым электроном. В итоге координатная пробная функция выбирается в виде

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) \pm \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1)], \quad (55.2)$$

где $\psi_{a,b}(\mathbf{r})$ — волновые функции одночастичной задачи в эффективном потенциале, который будет получен ниже, и верхний знак соответствует синглетному, а нижний — триплетному состояниям. Гамильтониан (54.1) не имеет прямой зависимости от спиновых состояний электронов, но энергия атома, конечно,

зависит от симметрии координатной волновой функции, а следовательно (вследствие принципа Паули), и от полного спина S . Действительно, для среднего значения энергии по состоянию (1)–(2) получим

$$E = \left\langle \psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2) \left| \hat{H} \right| \psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \mathbf{r}_2, \sigma_2) \right\rangle = E_a + E_b + C \pm Q, \quad (55.3)$$

где слагаемые

$$E_{a,b} = \left\langle \psi_{a,b}(\mathbf{r}) \left| -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{Ze^2}{r} \right| \psi_{a,b}(\mathbf{r}) \right\rangle \quad (55.4)$$

соответствуют энергии одного электрона в поле ядра, слагаемое C соответствует классическому взаимодействию (отталкиванию) электронов

$$C = \int \frac{dq(\mathbf{r}_1) dq(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (55.5)$$

$$dq(\mathbf{r}_1) = e|\psi_a(\mathbf{r}_1)|^2 d^3r_1, \quad dq(\mathbf{r}_2) = e|\psi_b(\mathbf{r}_2)|^2 d^3r_2,$$

а слагаемое $\pm Q$ с

$$Q = \text{Re} \int \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \psi_a^*(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_1) \psi_b^*(\mathbf{r}_2)\psi_a(\mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 \quad (55.6)$$

соответствует так называемому *обменному взаимодействию*¹¹, не имеющему классического аналога. Таким образом, энергия E атома оказывается зависящей от полного спина S системы двух электронов.

Для основного состояния гелия оба электрона находятся в синглетном состоянии с одной и той же координатной функцией $\psi(\mathbf{r})$, поэтому хартри-фоковская пробная функция оказывается симметричной:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2).$$

¹¹Можно показать, что величина $Q > 0$ (см. [2], задача 11.27).

Вариация функционала энергии по $\psi^*(\mathbf{r}_1)$ даёт уравнение

$$\int d^3r_2 \psi^*(\mathbf{r}_2) \left(\hat{H} - E \right) \psi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2) = 0,$$

или

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U_{\text{эфф}}(r) \right) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (55.7)$$

где

$$U_{\text{эфф}}(r) = -\frac{2e^2}{r} + \int d^3r' \psi^*(\mathbf{r}') \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta' - \frac{2e^2}{r'} + \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right) \psi(\mathbf{r}'). \quad (55.8)$$

Это сложное интегро-дифференциальное уравнение решается численно. Эффективный потенциал в этой задаче $U_{\text{эфф}}(r)$ определяется через электронные волновые функции, и он же определяет уровни энергии и волновые функции одноэлектронной задачи. Такое приближение называется приближением *самосогласованного поля*. Стартуя от некоторой пробной волновой функции $\psi(\mathbf{r})$, находим с помощью уравнения (8) эффективный потенциал $U_{\text{эфф}}(r)$, который затем используется в уравнении (7) для нахождения волновой функции следующего приближения. Затем процедура повторяется, пока не возникает с достаточной точностью совпадение последовательно определенных эффективных потенциалов.

Более сложным оказывается рассмотрение возбужденных уровней, когда функции $\psi_a(\mathbf{r})$ и $\psi_b(\mathbf{r})$ могут быть различными (см. [1], § 69).

§ 56. Метод Томаса – Ферми

Для атома с большим числом электронов $Z \gg 1$ можно использовать квазиклассическое приближение, позволяющее по-

лучить количественное описание сложного атома “в среднем”. Начнем с простых оценок.

С ростом заряда ядра, а следовательно, и числа электронов Z , радиус и объём атома существенно не изменяются. Дело в том, что размер атома определяется внешним электроном, который находится в экранированном поле ядра. Это поле оказывается того же порядка, что и поле в атоме водорода. Таким образом, размер любого атома порядка боровского радиуса a_B , а объём атома с Z электронами порядка a_B^3 .

Однако распределение электронов внутри атома неравномерное и большинство их находится не в объёме a_B^3 , а в меньшем объёме a_B^3/Z . Поэтому естественным размерным параметром расстояний в атоме является величина $a_B/Z^{1/3}$.

Покажем, что большинство электронов в атоме с большим Z сосредоточено на расстояниях $\langle r \rangle \sim a_B/Z^{1/3}$, заметно меньших a_B . Средний радиус $\langle r \rangle$ можно оценить из следующих соображений. В доступном фазовом объёме $\Delta\Gamma \sim \langle r \rangle^3 \langle p \rangle^3$ имеется $\sim \Delta\Gamma/\hbar^3$ ячеек, занятых Z электронами, поэтому

$$\left(\frac{\langle r \rangle \langle p \rangle}{\hbar} \right)^3 \sim Z. \quad (56.1)$$

С другой стороны, по теореме о вириале средняя кинетическая энергия одного электрона T и его средняя потенциальная энергия U по модулю сравнимы, значит для среднего импульса электрона мы имеем оценку

$$\langle p \rangle \sim \sqrt{mT} \sim \sqrt{m|U|} \sim \sqrt{mZe^2/\langle r \rangle}. \quad (56.2)$$

Сравнивая (1) и (2), получаем оценки

$$\langle r \rangle \sim \frac{a_B}{Z^{1/3}}, \quad \langle p \rangle \sim Z^{2/3} \frac{\hbar}{a_B}.$$

Отсюда средний момент импульса электрона имеет порядок

$$\langle l \rangle \sim \frac{\langle r \rangle \cdot \langle p \rangle}{\hbar} \sim Z^{1/3}.$$

Полная энергия атома примерно в Z раз отличается от средней потенциальной энергии одного электрона, т. е.

$$E \sim -Z \cdot \frac{Ze^2}{\langle r \rangle} \sim -Z^{7/3} \text{Ry}.$$

Квазиклассическое рассмотрение оказывается неприменимым на расстояниях порядка первой боровской орбиты. Ее радиус $\sim a_B/Z$, поскольку заряд ядра здесь неэкранирован. Поэтому энергия электронов на этой орбите $\sim -Z^2 \text{Ry}$. Эта энергия имеет величину порядка $1/Z^{1/3}$ от полной энергии атома. Квазиклассическое рассмотрение неприменимо также на границе атома, на расстояниях $\sim a_B$, где располагаются немногие внешние электроны.

Перейдем к выводу уравнения Томаса – Ферми (1927). В сложном атоме совокупность электронов можно приближенно рассматривать как газ невзаимодействующих фермионов при нулевой температуре, находящихся во внешнем самосогласованном потенциале $\varphi(r)$. Этот потенциал удовлетворяет уравнению Пуассона $\Delta\varphi = -4\pi\rho$, где плотность зарядов ρ определяется концентрацией электронов $n(r)$ и точечным ядром с зарядом Z (ниже в этом разделе используем атомную систему единиц), т. е.

$$\Delta\varphi = -4\pi[-n(r) + Z\delta(\mathbf{r})]. \quad (56.3)$$

Электроны занимают все ячейки фазового пространства вплоть до такого максимального значения импульса p_0 , что соответствующая энергия оказывается равной нулю:

$$\frac{p_0^2}{2} - \varphi = 0. \quad (56.4)$$

В итоге в объеме dV вблизи точки r находится

$$dN(r) = n(r) dV = 2 \frac{d\Gamma}{(2\pi)^3}$$

электронов, где $d\Gamma = dV \frac{4}{3}\pi p_0^3$ — элемент фазового объема, $(2\pi)^3$ — объем фазовой ячейки, а множитель 2 учитывает два возможных спиновых состояния электрона. Из уравнений (3)–(4) можно найти связь между концентрацией электронов и потенциалом:

$$n(r) = \frac{p_0^3}{3\pi^2} = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} \varphi^{3/2}(r). \quad (56.5)$$

Подставляя это соотношение в (3), получим уравнение для определения потенциала. Так как при $r \rightarrow 0$ потенциал стремится к величине Z/r , соответствующей потенциалу незэкранированного ядра, то удобно ввести новую функцию χ , такую что

$$\varphi = \frac{Z}{r} \chi,$$

для которой из уравнения Пуассона получаем уравнение

$$r^{1/2} \frac{d^2\chi}{dr^2} = \frac{8\sqrt{2}Z}{3\pi} \chi^{3/2}$$

с граничными условиями: $\chi \rightarrow 1$ при $r \rightarrow 0$ и $\chi \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. Если теперь ввести новую переменную x , такую что

$$r = \lambda \frac{x}{Z^{1/3}}, \quad \lambda = \left(\frac{3\pi}{8\sqrt{2}} \right)^{2/3} \approx 0,885,$$

то получим уравнение

$$x^{1/2} \frac{d^2\chi}{dx^2} = \chi^{3/2}, \quad (56.6)$$

в котором зависимость от Z исчезла. Это уравнение решается численно. Функция $\chi(x)$ изображена на рис. 29, она быстро падает с ростом аргумента, в частности, $\chi(0) = 1$, $\chi(1) = 0,42$, $\chi(10) = 0,024$.

Зная $\chi(x)$, найдем концентрацию электронов

$$n(r) = \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2} \left(\frac{Z}{r} \chi(x) \right)^{3/2}.$$

Используя эту функция, можно найти, например, радиус $R_{1/2}$ сферы, внутри которой сосредоточена половина всех электро-

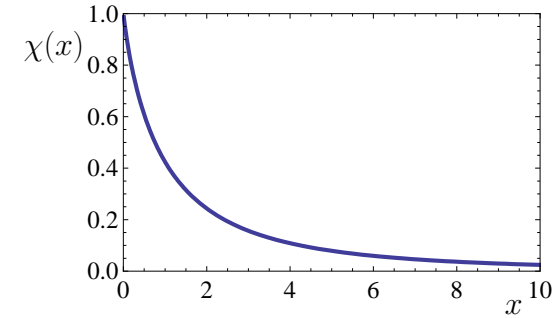


Рис. 29. График функции $\chi(x)$

нов. Он определится из уравнения

$$\int_0^{R_{1/2}} n(r) dV = \frac{1}{2} Z.$$

Численное решение этого уравнения дает значение (в обычных единицах)

$$R_{1/2} = 1,33 \frac{a_B}{Z^{1/3}},$$

что находится в согласии с приведенными в начале этого раздела оценками.

Задачи

56.1. В модели Томаса – Ферми для нейтрального атома выразить через электронную плотность $n(r)$ среднее расстояние электрона от ядра, кинетическую энергию электронов, энергию их взаимодействия друг с другом и с ядром.

56.2*. Электронный газ большой плотности находится внутри непроницаемой сферы. Кулоновское отталкивание прижимает электроны к стенке. Оценить толщину слоя, в котором находятся электроны.

§ 57. Структура гамильтониана атома

В сложных атомах гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{a=1}^Z \frac{\hat{\mathbf{p}}_a^2}{2m} + U_{\text{кул}} + \hat{V}_{\text{рел}}, \quad U_{\text{кул}} = - \sum_a \frac{Ze^2}{r_a} + \sum_{a < b} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|},$$

где потенциал $U_{\text{кул}}$ учитывает кулоновское притяжение электронов к ядру и взаимное отталкивание электронов, а $\hat{V}_{\text{рел}}$ учитывает релятивистские эффекты. При введении самосогласованного поля этот гамильтониан можно представить в виде суммы трех слагаемых

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{сам}} + \hat{V}_{\text{ост}} + \hat{V}_{\text{рел}}.$$

Здесь первое слагаемое $\hat{H}_{\text{сам}}$ отвечает самосогласованному центральному полю $V_{\text{сам}}(r)$, в котором движутся невзаимодействующие электроны,

$$\hat{H}_{\text{сам}} = \sum_{a=1}^Z \hat{H}_a, \quad \hat{H}_a = \frac{\hat{\mathbf{p}}_a^2}{2m} + V_{\text{сам}}(r_a).$$

В качестве примера укажем самосогласованное поле в приближении Томаса – Ферми:

$$V_{\text{сам}}(r) = -\frac{Ze^2}{r} \chi(x), \quad x = \frac{Z^{1/3} r}{0,885 a_B},$$

где функция $\chi(x)$ находится из уравнения (56.6).

В поле $V_{\text{сам}}(r)$ определяются одноэлектронные уровни энергии E_{nl} , которые и заполняются электронами с учетом принципа Паули. Возникает определенная *электронная конфигурация*, которая в грубом приближении описывает уровни энергии атома.

Остаточное кулоновское взаимодействие между электронами

$$\hat{V}_{\text{ост}} = U_{\text{кул}} - \sum_a V_{\text{сам}}(r_a)$$

учитывает отличие реального поля от самосогласованного поля. В таком поле сохраняется полный орбитальный момент импульса L и его проекция M_L , а также полный спин S и его проекция M_S . Как и в случае самосогласованного поля, остаточное взаимодействие между электронами не имеет прямой зависимости от спиновых состояний электронов, но оно, конечно, зависит от симметрии координатной волновой функции, а следовательно (вследствие принципа Паули), и от полного спина S . Таким образом, с учетом $\hat{V}_{\text{ост}}$ уровни энергии атома E_{SL} зависят от S и L , но не зависят от проекций M_S и M_L , а потому не зависят и от полного момента $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Порядок величины остаточного взаимодействия — обычная атомная энергия, Ry ; однако численно оно заметно меньше.

Последнее слагаемое $\hat{V}_{\text{рел}}$ определяет релятивистские эффекты — ср. формулу (51.1) для релятивистских поправок в атоме водорода. Наиболее важным из этих эффектов является спин-орбитальное взаимодействие, имеющее вид

$$\hat{V}_{ls} = \sum_a A(r_a) \hat{\mathbf{l}}_a \hat{\mathbf{s}}_a, \quad (57.1)$$

где $\hat{\mathbf{l}}_a$ и $\hat{\mathbf{s}}_a$ — операторы орбитального и спинового момента электрона, а функция $A(r_a)$ приближенно выражается через потенциальную энергию самосогласованного поля. Для одного электрона в кулоновском поле с зарядом Ze эта функция согласно

§ 51 равна

$$A(r) = \frac{Ze^2\hbar^2}{4m^2c^2} \frac{1}{r^3}. \quad (57.2)$$

Спин-орбитальное взаимодействие релятивистское по природе, и поэтому его величина $\sim (v/c)^2 Ry$. Это взаимодействие пропорционально r^{-3} и формируется на малых расстояниях $\sim a_B/Z$ от ядра, где кулоновское поле ядра неэкранировано и $v/c \sim Z\alpha$. Таким образом, величина спин-орбитального взаимодействия $\sim Z^2\alpha^2 Ry$. В тяжелых атомах оно сравнивается с остаточным кулоновским взаимодействием.

§ 58. Таблица Менделеева

См. [1], § 73.

§ 59. Атомные термы

59.1. Случай LS -связи

В легких атомах, где остаточное кулоновское взаимодействие доминирует по сравнению со спин-орбитальным взаимодействием, $|V_{\text{ост}}| \gg |V_{\text{рел}}|$, сохраняющимися величинами являются полный спин S и полный орбитальный момент импульса L . При этом разность уровней энергии с различными S и L велика по сравнению с интервалами тонкой структуры, определяемыми возмущением \hat{V}_{ls} . В этом случае говорят об LS -типе связи. При определении низшего уровня E_{SLJ} для данной электронной конфигурации имеют место эмпирические

Правила Хунда:

1. Состояние с низшей энергией соответствует максимальному значению S . Качественное объяснение этого правила таково. В

состоянии с максимальным S спиновая волновая функция “максимально симметрична”. А в силу принципа Паули более симметричной спиновой функции соответствует более антисимметричная координатная функция и потому более слабое кулоновское отталкивание электронов. Замкнутая оболочка (основное состояние благородных газов) — синглет, у которого $S = 0$.

2. Среди термов с максимальным значением S состоянию с низшей энергией соответствует максимальное значение L (при данном S). Качественное объяснение этого правила связано с тем, что большему значению L соответствуют большие расстояния электронов от ядра и потому более слабое кулоновское отталкивание электронов.

3. Энергия состояния тем ниже, чем меньше J для оболочки, заполненной не более чем наполовину (при данных S и L), т. е. для оболочки с числом электронов $< (2l + 1)$. В такой оболочке энергия увеличивается с ростом J , что является следствием роста энергии при увеличении j для одного электрона.

Для оболочки, заполненной наполовину или более чем наполовину (при данных S и L), т. е. для оболочки с числом электронов $\geq (2l + 1)$, энергия состояния тем ниже, чем больше J . Это связано с тем, что для дырки знак спин-орбитального взаимодействия обратный. Поэтому если оболочка заполнена больше чем наполовину, то энергия с ростом J падает. (Кстати, отсюда ясно, что для оболочки, заполненной ровно наполовину, спин-орбитальное расщепление в первом порядке отсутствует.)

Последнее правило Хунда связано с учетом спин-орбитального взаимодействия. Усредняя возмущение (57.1) по состояниям с определенными значениями S и L , мы получим оператор возмущения в виде

$$\langle LS | \hat{V}_{ls} | LS \rangle = A_{LS} \hat{L}\hat{S},$$

где постоянная $A_{LS} \geq 0$ для электронной оболочки, заполненной менее (более) чем наполовину. Тонкую структуру уровней найдем, используя теорию возмущений, причем в качестве волновых функций нулевого приближения можно взять состояния с определенным значением полного момента J :

$$E_{SLJ} = E_{SL} + A_{LS} \langle LSJ | \hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{S}} | LSJ \rangle = \\ = E_{SL} + A_{LS} \frac{1}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)].$$

Рассмотрим пример *атома гелия*. Его основное состояние $1s^2$ симметрично по координатам. Поэтому оно, в силу принципа Паули, антисимметрично по спинам, т. е. является синглетом 1S_0 . В первой возбужденной конфигурации $1s2s$ триплетное ортосостояние 3S_1 лежит ниже синглетного парасостояния 1S_0 . Действительно, волновая функция 3S_1 симметрична по спинам, и поэтому антисимметрична по координатам, что уменьшает кулоновское отталкивание электронов. Во втором возбужденном состоянии $1s2p$ снова триплетное состояние 3P лежит ниже синглетного 1P_1 по той же причине.

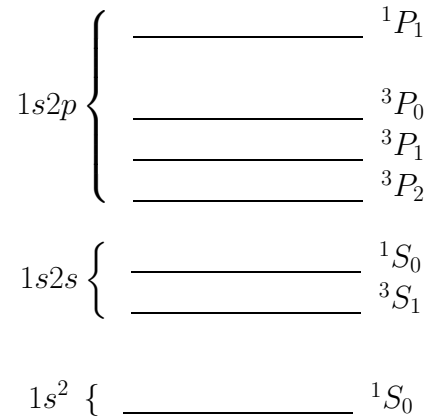


Схема уровней атома гелия

Необычная последовательность уровней тонкой структуры $^3P_2, ^3P_1, ^3P_0$ определяется совокупностью релятивистских эффектов, таких как спин-орбитальное взаимодействие и спин-спиновое взаимодействие (соответствующее взаимодействию магнитных моментов электронов).

59.2. Случай jj -связи

Рассмотрим теперь противоположный случай, когда спин-орбитальное взаимодействие существенно больше остаточного, $|V_{\text{ост}}| \ll |V_{\text{рел}}|$. Без учета $V_{\text{ост}}$ гамильтониан атома соответствует набору невзаимодействующих электронов, каждый из которых движется в потенциале

$$V_{\text{сам}}(r_a) + A(r_a) \hat{\mathbf{l}}_a \hat{\mathbf{s}}_a.$$

В таком поле сохраняется полный момент импульса отдельного электрона $j = l \pm 1/2$ и его проекция m_j . Из состояний $|nljm_j\rangle$ отдельных электронов строится (с учетом принципа Паули) состояние атома с определенными J и M_J . По этим последним состояниям и находятся поправки к энергии атома за счет возмущения $V_{\text{ост}}$.

Следует отметить, что случай jj -связи в чистом виде не встречается, для тяжелых атомов имеется промежуточная ситуация, когда $V_{\text{ост}}$ и V_{ls} имеют близкий порядок величины.

59.3. Пример: конфигурация p^2

Случай LS -связи.

По принципу Паули, состояние с $S = 1$, симметричное по спиновым переменным, антисимметрично по координатам и поэтому имеет $L = 1$. По аналогичной причине синглетные состояния с $S = 0$ имеют $L = 0, 2$. В силу первого и третьего правил Хунда три нижних состояния — это $^3P_{0,1,2}$.

Что касается синглетных уровней 1S_0 и 1D_2 , то их радиальные волновые функции одинаковы (мы пока пренебрегаем остаточным кулоновым взаимодействием между электронами). Сравним поэтому их угловые функции ψ_{LM} . Угловая функция a -го p -электрона $Y_{1m}(\mathbf{n}^{(a)})$ зависит от компонент единичного радиус-вектора $\mathbf{n}^{(a)} = \mathbf{r}_a/r_a$ (см. § 23.3). Волновая функция состояния 1S_0 , естественно, является скаляром

$$\psi_{00} = \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \mathbf{n}^{(1)} \cdot \mathbf{n}^{(2)}.$$

В качестве представителя 1D_2 состояний выберем, например, состояние с $L_z = +2$, это просто произведение одноэлектронных волновых функций, каждая из которых соответствует $l_z = +1$:

$$\psi_{22} = Y_{11}(\mathbf{n}^{(1)}) \cdot Y_{11}(\mathbf{n}^{(2)}) = \frac{3}{8\pi} \left(n_x^{(1)} + in_y^{(1)} \right) \cdot \left(n_x^{(2)} + in_y^{(2)} \right).$$

Наиболее существенный вклад в энергию отталкивания электронов $e^2/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ дает область близких значений их координат, когда $\mathbf{r}_1 \approx \mathbf{r}_2$. Рассмотрим предельный случай, когда координаты электронов совпадают. При $\mathbf{n}^{(1)} = \mathbf{n}^{(2)}$ отношение

$$\frac{|\psi_{22}|^2}{|\psi_{00}|^2} = \frac{3}{4} (n_x^2 + n_y^2)^2.$$

Даже максимальное значение этого отношения, равное $3/4$, меньше 1. Отсюда ясно, что кулоновское отталкивание в D -состоянии меньше, чем в S .

Итак, в LS -схеме расположение уровней в порядке возрастания энергии таково:

$${}^3P_{0,1,2}; \quad {}^1D_2; \quad {}^1S_0. \quad (59.1)$$

Случай jj -связи.

Чтобы найти расположение уровней конфигурации p^2 при больших Z , когда спин-орбитальное взаимодействие становится

сравнимым с остаточным кулоновским взаимодействием, удобно рассмотреть сначала случай предельно большого спин-орбитального взаимодействия, когда электрон характеризуется лишь полным моментом j , равным для p -электрона $1/2$ или $3/2$. Состояние двух p -электронов будем описывать набором $(j_1 j_2)_J$, в котором полный момент $J = 0, 1, 2$. Тогда возможные состояния таковы:

$$\left(\frac{11}{\frac{22}{} } \right)_0; \quad \left(\frac{13}{\frac{22}{} } \right)_1, \quad \left(\frac{13}{\frac{22}{} } \right)_2; \quad \left(\frac{33}{\frac{22}{} } \right)_0, \quad \left(\frac{33}{\frac{22}{} } \right)_2. \quad (59.2)$$

Действительно, при $j_1 = j_2 = 1/2$ нельзя организовать состояние с $J = 1$, так как состояние с $J_z = \pm 1$ невозможно в силу принципа Паули. По такой же причине (невозможно получить $J_z = \pm 3$) состояния $j_1 = 3/2, j_2 = 3/2$ не складываются в $J = 3$. Состояние $\left(\frac{33}{\frac{22}{} } \right)_1$ с $J_z = +1$ можно организовать единственным образом: из одноэлектронных проекций $-1/2$ и $+3/2$. Но одно такое состояние должно относиться к $J = 2$, так что и состояние $\left(\frac{33}{\frac{22}{} } \right)_1$ не осуществляется. Поскольку электрон с большим j имеет большую энергию, то последовательность уровней в порядке возрастания энергии прямо соответствует (2), причем запятые отделяют состояния с одинаковыми энергиями, а точки с запятыми — с разными.

Подчеркнем, что число состояний с заданным полным моментом J одно и то же в любой схеме сложения моментов.

Сравнение (1) с (2) показывает, что в случае, промежуточном между LS -связью и jj -связью, уровни располагаются в следующем порядке:

$$J = 0; \quad J = 1; \quad J = 2; \quad J = 2; \quad J = 0.$$

Здесь состояния с $J = 0$ — ортогональные линейные комбинации

ции 3P_0 и 1S_0 или

$$\begin{pmatrix} 11 \\ 22 \end{pmatrix}_0 \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} 33 \\ 22 \end{pmatrix}_0.$$

Аналогично состояния с $J = 2$ — ортогональные линейные комбинации 3P_2 и 1D_2 или

$$\begin{pmatrix} 13 \\ 22 \end{pmatrix}_2 \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} 33 \\ 22 \end{pmatrix}_2.$$

Задачи

59.1. Найти возможные термы конфигураций электронов $ns\ n'p$; $np\ n'p$; p^3 ; d^2 .

59.2. Квантованные колебания поверхности атомного ядра имеют момент 2. Какие полные моменты допустимы для состояний, в которых имеются два или три таких кванта? Чему равно полное число состояний системы N квантов (с учетом разных значений проекции полного момента)?

59.3. Найти термы и магнитные моменты основных состояний атомов P, Cr, S, V, Al, Fe, Cl, Ti.

59.4. Рассмотрим следующую модель. Пусть электроны находятся в притягивающем кулоновском (или ньютоновом) поле ядра, а остаточное взаимодействие между ними не отталкивающее, а притягивающее (гравитационный атом). Изменятся ли для такой системы первое и второе правила Хунда?

59.5*. Можно ли считать водородоподобным спектр высоковозбужденных ($n \gg 1$) состояний внешнего электрона в многоэлектронном атоме? Сравнить ширину “полосы” состояний, имеющих данное n , но разные l , с расстоянием между центрами “полос” n и $n - 1$.

§ 60. Атом в магнитном поле

Выберем для постоянного и однородного внешнего магнитного поля $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ калибровку, в которой векторный потенциал

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}.$$

Этот потенциал коммутирует с оператором импульса, при этом

$$\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} = \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{2} \mathbf{B} (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}) = \frac{1}{2} \mathbf{B} \hbar \hat{\mathbf{l}}.$$

В гамильтониане Паули (37.1) для одного электрона во внешнем магнитном поле слагаемые, линейные \hat{V}_1 и квадратичные \hat{V}_2 по полю имеют вид

$$\begin{aligned} \hat{V}_1 &= -\frac{e}{2mc} (\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} + \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) - \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma}\mathbf{B} = -\frac{e\hbar}{2mc} (\hat{\mathbf{l}} + \boldsymbol{\sigma})\mathbf{B}, \\ V_2 &= \frac{e^2}{2mc^2} \mathbf{A}^2 = \frac{e^2}{8mc^2} [\mathbf{r} \times \mathbf{B}]^2. \end{aligned}$$

Для многоэлектронного атома после суммирования по всем электронам получаем

$$\begin{aligned} \hat{V}_1 &= -\frac{e\hbar}{2mc} \sum_a (\hat{\mathbf{l}}_a + \boldsymbol{\sigma}_a) \mathbf{B} = \mu_B (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \mathbf{B} = \mu_B (\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}}) \mathbf{B}, \\ \hat{V}_2 &= \frac{e^2}{8mc^2} \sum_a [\mathbf{r}_a \times \mathbf{B}]^2, \end{aligned}$$

где $\hat{\mathbf{L}}$, $\hat{\mathbf{S}}$, $\hat{\mathbf{J}}$ — суммарный орбитальный, спиновый и полный моменты атома.

Рассмотрим поправки к энергии атома, линейные по полю. В слабом внешнем поле в качестве невозмущенных состояний можно использовать состояния с определенными значениями операторов $\hat{\mathbf{S}}^2$, $\hat{\mathbf{L}}^2$, $\hat{\mathbf{J}}^2$ и \hat{J}_z , равными $S(S+1)$, $L(L+1)$, $J(J+1)$ и M_J . Тогда поправка к энергии атома равна (см. § 27)

$$\Delta E = \langle SLJM_J | \hat{V}_1 | SLJM_J \rangle = \mu_B g M_J B,$$

где

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}$$

— фактор Ланде. Это так называемый *аномальный эффект Зеемана*.

$$p_{3/2} \left\{ \begin{array}{l} \text{-----} m_j = +3/2, \\ \text{-----} m_j = +1/2, \\ \text{-----} m_j = -1/2, \\ \text{-----} m_j = -3/2, \end{array} \right.$$

$$p_{1/2} \left\{ \begin{array}{l} \text{-----} m_j = +1/2, \\ \text{-----} m_j = -1/2, \end{array} \right.$$

Аномальный эффект Зеемана для одного p-электрона

В сильном магнитном поле можно пренебречь тонкой структурой уровней и в качестве невозмущенных состояний можно использовать состояния с определенными значениями операторов $\hat{\mathbf{S}}^2$, \hat{S}_z , $\hat{\mathbf{L}}^2$ и \hat{L}_z , равными соответственно $S(S+1)$, M_S , $L(L+1)$ и M_L . Тогда

$$\Delta E = \langle SM_S LM_L | \hat{V}_1 | SM_S LM_L \rangle = \mu_B (M_L + 2M_S) B.$$

Это так называемый *нормальный эффект Зеемана*.

$$\begin{array}{l} \text{-----} m_l = +1, \quad m_s = +1/2 \\ \text{-----} m_l = 0, \quad m_s = +1/2 \\ \text{-----} m_l = \pm 1, \quad m_s = \mp 1/2 \\ \text{-----} m_l = 0, \quad m_s = -1/2 \\ \text{-----} m_l = -1, \quad m_s = -1/2 \end{array}$$

Нормальный эффект Зеемана для одного p-электрона

В промежуточной области, когда энергия взаимодействия магнитного момента с полем сравнивается со спин-орбитальным взаимодействием, эти два взаимодействия нужно

учитывать одновременно. Это так называемый *эффект Пащенко – Бака*. Порядок величины критического магнитного поля $B_c \sim 10^4$ Гс.

При $L = S = 0$ работает лишь квадратичное по полю слагаемое \hat{V}_2 . Поправка к энергии атома положительна и сводится с учетом сферической симметрии задачи ($L = 0$) к

$$\Delta E = \frac{e^2 B^2}{12mc^2} \sum_a \langle r_a^2 \rangle.$$

В этом случае магнитная восприимчивость атома

$$\chi = -\frac{\partial^2 \Delta E}{\partial B^2} = -\frac{e^2}{6mc^2} \sum_a \langle r_a^2 \rangle$$

отрицательна, атом ведет себя как диамагнетик.

Если $J = 0$, но $L = S \neq 0$, то из-за малых интервалов тонкой структуры доминирует поправка второго порядка по \hat{V}_1 . Эта поправка к энергии основного состояния отрицательна, так что возникает своеобразный парамагнетизм атома в отсутствие исходного магнитного момента.

Задача

60.1. Определить расщепления терма с $S = 1/2$ в эффекте Пащенко – Бака.

§ 61. Сверхтонкая структура (СТС)

СТС обусловлена взаимодействием магнитного момента электрона, орбитального и спинового, с магнитным моментом ядра. Заметно меньший вклад в СТС дают высшие мультипольные моменты ядра — электрический квадрупольный и магнитный октупольный.

Грубая оценка поправки к энергии за счет взаимодействия магнитных моментов:

$$E_{\text{СТС}} \sim \left\langle \frac{\mu_e \mu_p}{r^3} \right\rangle \sim \frac{e\hbar}{2mc} \frac{e\hbar}{m_p c a_B^3} \sim \alpha^2 \frac{m}{m_p} \text{Ry}.$$

Первый множитель, α^2 , отражает релятивистскую природу эффекта; отношение масс электрона и протона, m/m_p , — это оценка отношения магнитных моментов ядра и электрона.

При расчете СТС для одного электрона используем взаимодействие

$$\hat{V} = -\frac{e}{2mc} (\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}} + \hbar\boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{B}}),$$

следующее из уравнения Паули (37.1). Здесь

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{\hat{\boldsymbol{\mu}} \times \mathbf{r}}{r^3} = \nabla \frac{1}{r} \times \hat{\boldsymbol{\mu}}$$

— векторный потенциал, создаваемый магнитным моментом ядра $\hat{\boldsymbol{\mu}}$. Этот потенциал коммутирует с оператором импульса, так что

$$\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hat{\boldsymbol{\mu}}}{r^3} (\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}) = \frac{\hat{\boldsymbol{\mu}} \hat{\mathbf{l}}}{r^3}.$$

Магнитное поле ядра равно¹²

$$\hat{\mathbf{B}} = \nabla \times \hat{\mathbf{A}} = \frac{3\mathbf{n}(\mathbf{n}\hat{\boldsymbol{\mu}}) - \hat{\boldsymbol{\mu}}}{r^3} + \frac{8\pi}{3} \hat{\boldsymbol{\mu}} \delta(\mathbf{r}), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}.$$

В итоге взаимодействие сводится к виду

$$\hat{V} = -\frac{e\hbar}{2mc} \left[\frac{2\hat{\boldsymbol{\mu}}\hat{\mathbf{l}}}{r^3} + \frac{3(\mathbf{n}\boldsymbol{\sigma})(\mathbf{n}\hat{\boldsymbol{\mu}}) - \boldsymbol{\sigma}\hat{\boldsymbol{\mu}}}{r^3} + \frac{8\pi}{3} \hat{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\sigma} \delta(\mathbf{r}) \right].$$

¹²При этом учитываем, что

$$\nabla_i \nabla_k \frac{1}{r} = \frac{3x_i x_k}{r^5} - \frac{\delta_{ik}}{r^3} - \frac{4\pi}{3} \delta_{ik} \delta(\mathbf{r}).$$

Рассмотрим поправку к энергии s -состояния атома водорода с главным квантовым числом n . Для атома водорода оператор $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ — магнитный момент протона:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = 2,79 \cdot \frac{|e|\hbar}{2m_p c} \boldsymbol{\sigma}_p,$$

где $(1/2)\boldsymbol{\sigma}_p$ — спин протона. Обсуждаемая поправка определяется только последним слагаемым в операторе \hat{V} и равна

$$E_{\text{СТС}} = \frac{|e|\hbar}{2mc} \frac{8\pi}{3} |\psi_{n00}(0)|^2 \langle \hat{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\sigma} \rangle$$

или (с учетом того, что $|\psi_{n00}(0)|^2 = 1/(\pi a_B^3 n^3)$ — см. § 51)

$$E_{\text{СТС}} = \frac{|e|\hbar}{2mc} \frac{8\pi}{3} \frac{1}{\pi a_B^3 n^3} 2,79 \frac{|e|\hbar}{2m_p c} \langle \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}_p \rangle.$$

Здесь

$$\langle \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}_p \rangle = 2F(F+1) - 3,$$

где $\hat{\mathbf{F}} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}_p)$ — полный момент атома. Сверхтонкое расщепление основного состояния атома водорода, т. е. разность энергий состояний с $F = 1$ и $F = 0$, оказывается, таким образом, равным

$$\Delta E_{\text{СТС}} \equiv E_{\text{СТС}}(F = 1) - E_{\text{СТС}}(F = 0) = 2,79 \cdot \frac{16}{3} \alpha^2 \frac{m}{m_p} \text{Ry}.$$

Численно это составляет $\Delta E_{\text{СТС}}/(2\pi\hbar) = 1420$ МГц, что соответствует длине волны излучения, равной 21 см. Именно на этой волне, отвечающей универсальному излучению межзвездного водорода, искали сигналы от внеземных цивилизаций.

Оценим зависимость СТС от Z в сложных атомах, сравнив ее с тонкой структурой. Как было показано в § 57, тонкая структура имеет порядок $Z^2 \alpha^2 \text{Ry}$. Но спин-орбитальное взаимодействие обусловлено электрическим полем ядра, которое пропорционально Z , а СТС — магнитным полем ядра, которое от Z

не зависит. Таким образом, оценка для СТС составляет

$$Z\alpha^2 \frac{m}{m_p} \text{Ry}.$$

Задачи

61.1. Найти СТС для основного состояния атома водорода, вычисляя непосредственно $\mathbf{B}(0)$ — магнитное поле, создаваемое электроном в области ядра.

61.2. Сравнить СТС водорода и дейтерия.

61.3. Найти расщепление уровней с $n = 1$ для атома водорода в магнитном поле, если энергия взаимодействия с полем сравнима с интервалами сверхтонкой структуры. Оценить необходимую для этого напряженность магнитного поля.

61.4. Терм $D_{5/2}$ в оптическом спектре $^{39}_{19}\text{K}$ имеет сверхтонкую структуру, состоящую из четырех компонент. Каково значение спина ядра? Какое следует ожидать соотношение интервалов в сверхтонком квадруплете?

§ 62. Изотопический сдвиг

Изотопами называются атомы с одним и тем же зарядом ядра Ze , но различными массами $M \approx Am_p$ и

$$M + \Delta M \approx (A + \Delta A) m_p,$$

где массовое число A равно числу протонов и нейтронов в ядре, а m_p — масса протона. Изотопическое смещение уровней связано с разностью масс изотопов и с различными размерами ядер-изотопов

Эффект массы обусловлен изменением массы ядра M от изотопа к изотопу. В водороде приведенная масса равна

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \approx m \left(1 - \frac{m}{M}\right).$$

Поэтому уровни энергии

$$E_n = \left(1 - \frac{m}{M}\right) E_n^0, \quad E_n^0 = -\frac{\text{Ry}}{n^2}$$

для водорода и дейтерия несколько различаются:

$$\Delta E_n = E_n(\text{D}) - E_n(\text{H}) = \left(\frac{m}{2m_p} - \frac{m}{m_p}\right) E_n^0 = -\frac{m}{2m_p} E_n^0.$$

Соответственно изменяется частота излучения при переходе с уровня E_i на уровень E_f :

$$\delta\omega = -\frac{m}{2m_p} \omega, \quad \omega = \frac{E_i^0 - E_f^0}{\hbar},$$

относительная изменение частоты составляет

$$\frac{|\delta\omega|}{\omega} = \frac{m}{2m_p} \approx 2 \cdot 10^{-4},$$

В многоэлектронных атомах эффект массы связан с кинетической энергией ядра $\hat{K} = \hat{\mathbf{P}}^2/(2M)$. Импульс ядра $\hat{\mathbf{P}}$ равен с обратным знаком сумме импульсов электронов: $\hat{\mathbf{P}} = -\sum_a \hat{\mathbf{p}}_a$, поэтому

$$\hat{\mathbf{P}}^2 = \sum_a \hat{\mathbf{p}}_a^2 + \sum_{a \neq b} \hat{\mathbf{p}}_a \hat{\mathbf{p}}_b.$$

Изотопический сдвиг составляет

$$\Delta E_M = -\frac{\Delta M}{2M^2} \langle \hat{\mathbf{P}}^2 \rangle = -\frac{\Delta A}{A^2} \frac{m}{m_p} \langle \hat{K}_1 + \hat{K}_2 \rangle,$$

где

$$\hat{K}_1 = \frac{1}{2m} \sum_a \hat{\mathbf{p}}_a^2, \quad \hat{K}_2 = \frac{1}{2m} \sum_{a \neq b} \hat{\mathbf{p}}_a \hat{\mathbf{p}}_b.$$

Кинетическая энергия атома $\langle \hat{K}_1 \rangle$ по теореме о вириале равна с обратным знаком энергии атома $\langle \hat{K}_1 \rangle = -E_n^0$, величина

$\langle \hat{K}_2 \rangle$ обычно меньше или порядка $\langle \hat{K}_1 \rangle$. В итоге для обычных оптических переходов получаем оценку:

$$\left| \frac{\delta\omega}{\omega} \right|_M \sim \frac{\Delta A}{A^2} \frac{m}{m_p}.$$

Эффект объёма обусловлен изменением радиуса ядра R от изотопа к изотопу:

$$R \approx A^{1/3} r_0, \quad r_0 = 1,2 \cdot 10^{-13} \text{ см.}$$

Это приводит к соответствующему изменению электростатического потенциала ядра. Истинная потенциальная энергия взаимодействия электрона с ядром имеет вид

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \delta U(r)$$

и отличается от кулоновского взаимодействия на величину $\delta U(r) \sim Ze^2/R$ при $r < R$; при $r > R$ искажение кулоновского потенциала отсутствует и $\delta U(r) = 0$. Возмущение $\delta U(r)$ приводит к заметному сдвигу уровней только для s -электронов, для которых

$$\Delta E_{ns} = \int \delta U(r) |\psi_{ns}(r)|^2 d^3r \sim \frac{Ze^2}{R} |\psi_{ns}(0)|^2 R^3.$$

Расчет (см.: [1], § 120) дает следующую зависимость соответствующей поправки к энергии s -электрона от радиуса ядра R при однородной плотности заряда внутри ядра:

$$\frac{2\pi}{5} Ze^2 R^2 |\psi_{ns}(0)|^2.$$

С учетом оценки для волновой функции $|\psi_{ns}(0)|^2 \sim Z/a_B^3$ (см.: [1], § 71) получаем оценку для разности уровней:

$$\Delta E_V \sim \Delta A \cdot A^{-1/3} Z^2 \left(\frac{r_0}{a_B} \right)^2 R_y.$$

Отношение эффекта объёма к эффекту массы таково:

$$\frac{\Delta\omega_V}{\Delta\omega_M} \sim Z^2 A^{5/3} \frac{m_p}{m} \left(\frac{r_0}{a_B} \right)^2 \sim 10^{-6} Z^{11/3},$$

напомним, что $A \approx 2Z$. Начиная с $Z \sim 40$ эффект объёма обычно доминирует.

Исследование изотопического смещения уровней в тяжёлых атомах и сверхтонкой структуры — источник ценной информации о свойствах атомных ядер.

$\Psi_i^0(x, t)$ при $t \rightarrow -\infty$ в состояние $\Psi_f^0(x, t)$ при $t \rightarrow +\infty$, предполагая вначале, что эти состояния принадлежат дискретному спектру и не являются вырожденными.

Пусть $\Psi(x, t)$ есть решение уравнения Шрёдингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(x, t),$$

с начальным условием $\Psi(x, t) \rightarrow \Psi_i^0(x, t)$ при $t \rightarrow -\infty$, тогда искомая вероятность перехода есть

$$W_{i \rightarrow f} = |a_{fi}(+\infty)|^2, \quad a_{fi}(t) = \langle \Psi_f^0(x, t) | \Psi(x, t) \rangle.$$

Чтобы найти функцию $\Psi(x, t)$, сделаем подстановку¹³

$$\Psi(x, t) = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \Phi(x, t),$$

тогда для функции $\Phi(x, t)$ получим уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(x, t)}{\partial t} = \hat{V}_I(t) \Phi(x, t), \quad \hat{V}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \hat{V}(t) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}. \quad (63.1)$$

Это уравнение содержит в правой части только малое возмущение $\hat{V}_I(t)$ (без основного оператора \hat{H}_0 , входящего в правую часть уравнения Шрёдингера) и потому удобно для построения последовательной теории возмущений.

Первое приближение теории возмущений

В качестве нулевого приближения используем невозмущённую волновую функцию

$$\Phi^0(x, t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \Psi_i^0(x, t) = \psi_i^0(x),$$

¹³Эта замена отвечает так называемому *представлению взаимодействия*, весьма полезному в квантовой теории поля. При $\hat{V}(t) \rightarrow 0$ представление взаимодействия совпадает с гайзенберговским представлением.

Глава X

ИЗЛУЧЕНИЕ

§ 63. Нестационарная теория возмущений

Пусть гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t),$$

где для невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 известны его собственные функции стационарных состояний

$$\Psi_n^0(x, t) = \psi_n^0(x) e^{-iE_n^0 t/\hbar}$$

и соответствующие энергии E_n^0 :

$$\hat{H}_0 \psi_n^0(x) = E_n^0 \psi_n^0(x),$$

а $\hat{V}(t)$ — малое возмущение, зависящее от времени. Предполагается, что это возмущение включается в начале процесса ($\hat{V}(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow -\infty$). Мы рассмотрим переходы под действием этого возмущения для двух вариантов поведения $\hat{V}(t)$ при $t \rightarrow +\infty$.

63.1. Возмущение, действующее в течение конечного времени

Рассмотрим случай, когда $\hat{V}(t)$ — малое возмущение, включаемое в начале и выключающееся в конце процесса: $\hat{V}(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \mp\infty$. Найдем вероятность перехода из состояния

тогда первое приближение получается при подстановке этой функции в правую часть уравнения (1) и выполнении интегрирования:

$$\Phi^1(x, t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) \psi_i^0(x).$$

В итоге с точностью до членов первого порядка включительно мы получим волновую функцию

$$\Psi(x, t) = \Psi_i^0(x, t) - \frac{i}{\hbar} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) \psi_i^0(x)$$

и амплитуду перехода (при $\psi_f^0(x) \neq \psi_i^0(x)$)

$$a_{fi}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t V_{fi}(t_1) e^{i\omega_{fi}t_1} dt_1, \quad \omega_{fi} = \frac{E_f^0 - E_i^0}{\hbar}, \quad (63.2)$$

где

$$V_{fi}(t) = \langle \psi_f^0(x) | \hat{V}(t) | \psi_i^0(x) \rangle$$

есть зависящий от времени матричный элемент оператора возмущения. Таким образом, искомая вероятность равна

$$W_{i \rightarrow f} = \left| \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}t} dt \right|^2. \quad (63.3)$$

Если конечное состояние принадлежит непрерывному спектру с волновыми функциями, нормированными на δ -функцию “по шкале” ν_f , то полученный ответ надо умножить на число конечных состояний с квантовыми числами от ν_f до $\nu_f + d\nu_f$, при этом дифференциальная вероятность перехода есть

$$dW_{i \rightarrow f} = \left| \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}t} dt \right|^2 d\nu_f. \quad (63.4)$$

Найденная нами вероятность перехода определяется компонентой Фурье матричного элемента оператора возмущения на

частоте перехода ω_{fi} . Если возмущение включается и выключается очень плавно, так что характерное время $\tau \gg 1/\omega_{fi}$ (так называемый случай *адиабатического возмущения*), то вероятность перехода оказывается очень малой (см. пример ниже).

Второй порядок теории возмущений

Второй порядок может быть получен при подстановке в правую часть уравнения (1) волновой функции первого приближения $\Phi^1(x, t)$, что приводит к волновой функции

$$\begin{aligned} \Phi^2(x, t) &= \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) \Phi^1(x, t_1) = \\ &= \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{-\infty}^t dt_1 \hat{V}_I(t_1) \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_2) \psi_i^0(x) \end{aligned}$$

и амплитуде перехода

$$a_{fi}^2(t) = \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \langle \psi_f^0(x) | \hat{V}_I(t_1) \hat{V}_I(t_2) | \psi_i^0(x) \rangle.$$

Между операторами $\hat{V}_I(t_1)$ и $\hat{V}_I(t_2)$ проложим полный набор промежуточных состояний

$$1 = \sum_n | \psi_n^0(x) \rangle \langle \psi_n^0(x) |$$

и получим окончательно

$$a_{fi}^2(t) = \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^2 \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \sum_n V_{fn}(t_1) V_{ni}(t_2) e^{i(\omega_{fn}t_1 + \omega_{ni}t_2)}. \quad (63.5)$$

Этот ответ можно интерпретировать таким образом: во втором порядке теории возмущений переход из начального состояния в конечное происходит через промежуточные состояния

$$| \psi_i^0 \rangle \rightarrow | \psi_n^0 \rangle \rightarrow | \psi_f^0 \rangle.$$

Рассмотрим частный случай, когда оператор

$$\hat{V}(t) = \hat{V} e^{-i\omega t + \lambda t},$$

где λ — малая положительная величина, а $\exp(\lambda t)$ моделирует исчезновение возмущения при $t \rightarrow -\infty$. В этом случае интеграл по t_2 легко вычисляется и амплитуда перехода

$$a_{fi}^2(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t M_{fi}(t_1) e^{i\omega_{fi}t_1} dt_1, \quad (63.6)$$

$$M_{fi}(t) = \sum_n \frac{V_{fn}(t) V_{ni}(t)}{E_i^0 - E_n^0 + \hbar\omega}$$

имеет такой же вид как и амплитуда в первом приближении (см. (2)) с заменой $V_{fi}(t_1) \rightarrow M_{fi}(t_1)$.

Периодическое возмущение

Рассмотрим переходы под действием внешнего поля, которое в течение длительного времени $T \gg 1/\omega_{fi}$ изменяется по гармоническому закону:

$$\hat{V}(t) = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^+ e^{i\omega t} \quad (63.7)$$

при $|t| < T/2$, и выключается вне этого интервала: $\hat{V}(t) = 0$ при $|t| > T/2$. Здесь \hat{F} — не зависящий от времени оператор, который, однако, может зависеть от координат, импульсов и т. д. При таких переходах в первом приближении происходит либо поглощение кванта поля $\hbar\omega$, так что конечная энергия $E_f^0 = E_i^0 + \hbar\omega$, либо испускание кванта, при этом $E_f^0 = E_i^0 - \hbar\omega$. Вероятность каждого из этих переходов оказывается пропорциональна времени T , и поэтому удобной величиной является вероятность перехода в единицу времени:

$$dw_{i \rightarrow f} \equiv \frac{dW_{i \rightarrow f}}{T}. \quad (63.8)$$

Полезно прочитать детальное рассмотрение этого случая в Лекции 27 из [4]. Мы приведем здесь только краткий вывод основных формул.

Используя формулу (1), найдем амплитуды перехода

$$a_{fi}(\infty) = -\frac{i}{\hbar} F_{fi} I_- - \frac{i}{\hbar} F_{fi}^+ I_+, \quad (63.9)$$

где

$$I_{\pm} = \int_{-T/2}^{T/2} e^{i(\omega_{fi} \pm \omega)t} dt \rightarrow 2\pi \delta(\omega_{fi} \pm \omega) \text{ при } T \rightarrow \infty.$$

Первое слагаемое в (9) соответствует поглощению кванта $\hbar\omega$, вероятность такого процесса пропорциональна I_-^2 , что можно трактовать следующим образом:

$$I_-^2 = 2\pi \delta(\omega_{fi} - \omega) \int_{-T/2}^{T/2} e^{i(\omega_{fi} - \omega)t} dt = 2\pi \delta(\omega_{fi} - \omega) T.$$

В итоге вероятность перехода $\psi_i^0 \rightarrow \psi_f^0$ в единицу времени с поглощением кванта $\hbar\omega$ равна

$$dw_{i \rightarrow f}^{\text{пог}} = \frac{2\pi}{\hbar^2} |F_{fi}|^2 \delta(\omega_{fi} - \omega) d\nu_f = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f^0 - E_i^0 - \hbar\omega) d\nu_f. \quad (63.10)$$

Аналогично второе слагаемое в (9) соответствует испусканию кванта $\hbar\omega$, вероятность (в единицу времени) такого процесса равна

$$dw_{i \rightarrow f}^{\text{исп}} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}^+|^2 \delta(E_f^0 - E_i^0 + \hbar\omega) d\nu_f. \quad (63.11)$$

Переходы в непрерывном спектре под действием постоянного возмущения

Используя полученные формулы предыдущего раздела в предельном случае $\omega \rightarrow 0$, можно найти вероятность перехода (в

единицу времени) в непрерывном спектре под действием постоянного (не зависящего от времени) возмущения. В первом порядке эта вероятность равна

$$dw_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(E_f^0 - E_i^0) d\nu_f. \quad (45.12)$$

Если матричный элемент V_{fi} равен нулю или очень мал, то необходимо использовать второй порядок теории возмущений (см. формулу (6)), что даёт

$$dw_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{fi}|^2 \delta(E_f^0 - E_i^0) d\nu_f, \quad M_{fi} = \sum_n \frac{V_{fn}V_{ni}}{E_i^0 - E_n^0}. \quad (63.13)$$

63. 2. Возмущение $\hat{V}(t)$, конечное при $t \rightarrow +\infty$

Рассмотрим теперь случай, когда $\hat{V}(t)$ — малое возмущение, включающееся в начале процесса, $\hat{V}(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow -\infty$, и остающееся конечным в конце процесса:

$$\hat{V}(t) \rightarrow \hat{V}(\infty) \neq 0 \quad \text{при } t \rightarrow +\infty.$$

В этом случае естественно определять вероятность перехода из начального стационарного состояния $\Psi_i^0(x, t)$, принадлежащего дискретному спектру гамильтониана \hat{H}_0 , в конечное стационарное состояние $\Psi_f'(x, t)$, принадлежащее гамильтониану $\hat{H}' = \hat{H}_0 + \hat{V}(\infty)$. В первом приближении это конечное состояние имеет энергию

$$E_f' = E_f^0 + \left\langle \psi_f^0(x) \left| \hat{V}(\infty) \right| \psi_f^0(x) \right\rangle,$$

а его волновая функция равна

$$\Psi_f'(x, t) = \left[\psi_f^0(x) + \sum_{n \neq f} \frac{V_{nf}(\infty)}{E_n^0 - E_f^0} \psi_n^0(x) \right] e^{-iE_f't/\hbar}.$$

Повторяя выкладки предыдущего раздела, найдем амплитуду перехода в первом приближении:

$$a_{fi}(t) = \frac{V_{if}^*(\infty)}{E_i^0 - E_f^0} e^{i\omega_{fi}t/\hbar} - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t V_{fi}(t) e^{i\omega_{fi}t} dt.$$

Проводя далее интегрирование по частям и учитывая, что $V_{if}^*(\infty) = V_{fi}(\infty)$, получим окончательно амплитуду перехода

$$a_{fi}(t) = \frac{1}{\hbar\omega_{fi}} \int_{-\infty}^t \frac{\partial V_{fi}(t)}{\partial t} e^{i\omega_{fi}t} dt$$

и вероятность перехода

$$W_{i \rightarrow f} = \left| \frac{1}{\hbar\omega_{fi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial V_{fi}(t)}{\partial t} e^{i\omega_{fi}t} dt \right|^2. \quad (63.14)$$

Рассмотрим случай, когда возмущение включается в момент времени t_0 очень быстро, так что характерное время включения $\tau \ll 1/\omega_{fi}$ (так называемое *внезапное возмущение*). В этом случае в интеграле (14) медленно изменяющуюся функцию $\exp(i\omega_{fi}t)$ можно вынести из-под знака интеграла в виде множителя $\exp(i\omega_{fi}t_0)$ и получить вероятность перехода в виде

$$W_{i \rightarrow f} = \left| \frac{V_{fi}(\infty)}{\hbar\omega_{fi}} \right|^2. \quad (63.15)$$

63.3. Пример: возбуждение атома водорода пролетающим ионом

Ион считается настолько тяжёлым, что траектория его $\mathbf{R}(t)$ прямолинейна, заряд иона Ze . Возмущение $V(t)$ складывается из взаимодействия с электроном и с ядром:

$$V(t) = -\frac{Ze^2}{|\mathbf{R}(t) - \mathbf{r}_e|} + \frac{Ze^2}{|\mathbf{R}(t) - \mathbf{r}_p|}, \quad \mathbf{R}(t) = \boldsymbol{\rho} + \mathbf{v}t = (vt, \rho, 0).$$

Относительно прицельного параметра ρ предполагаем, что он много больше боровского радиуса: $\rho \gg a_B$. Тогда

$$V(t) = -\frac{Ze^2 \mathbf{Rr}}{R^3} = -Ze^2 \frac{xvt + y\rho}{(\rho^2 + v^2 t^2)^{3/2}},$$

где $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p$ — обычная атомная координата. По правилам отбора, это возмущение вызывает переходы из основного s -состояния в p -состояния с $l_z = \pm 1$. Ограничимся состоянием $2p$ и рассмотрим сначала $l_z = +1$, тогда

$$x_{fi} = iy_{fi} = -\frac{2^7}{3^5} a_B, \quad \omega_{fi} = \frac{E_2 - E_1}{\hbar} = \frac{3}{8} \frac{e^2}{\hbar a_B}.$$

Введем безразмерные величины ξ и β :

$$\xi = \frac{t}{\tau}, \quad \beta = \tau \omega_{fi} = \frac{\rho}{\rho_0},$$

где характерное время пролета $\tau = \rho/v$, а характерный прицельный параметр

$$\rho_0 = \frac{8}{3} \frac{\hbar v}{e^2} a_B.$$

В этих обозначениях амплитуда перехода (2) равна

$$a_{fi}(\infty) = \frac{2Ze^2}{\hbar v} \frac{x_{fi}}{\rho} I(\beta), \quad I(\beta) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\beta\xi} \frac{i\xi + 1}{(1 + \xi^2)^{3/2}} d\xi.$$

Функция $I(\beta) = 1$ при малых $\beta \ll 1$ и быстро падает с ростом β . Если перейти в комплексную плоскость с разрезом вдоль мнимой оси от $\xi = i$ до бесконечности, то легко получить, что

$$I(\beta) = e^{-\beta} \int_0^{\infty} e^{-\beta\xi} \frac{d\xi}{\sqrt{\xi(2 + \xi)^3}}.$$

Отсюда находится асимптотика:

$$I(\beta) = \sqrt{\frac{\pi}{8\beta}} e^{-\beta} \text{ при } \beta \gg 1.$$

Рассмотрим два предельных случая.

1. Медленный ион, параметр $\tau\omega_{fi} = \beta \gg 1$, что соответствует адиабатическому возмущению. В этом случае $\rho \gg \rho_0$ и вероятность (с учетом удвоения от вклада $l_z = -1$) оказывается, как и следовало ожидать, экспоненциально малой:

$$W(\rho) = A \frac{Z^2 e^2}{\hbar v} \frac{a_B^3}{\rho^3} e^{-2\rho/\rho_0}, \quad A = \frac{2^{17}}{3^{11}} \pi \approx 2,32.$$

2. Быстрый ион, его скорость $Ze^2/\hbar \ll v \ll c$. При этом характерный прицельный параметр $\rho_0 \gg a_B$. В области прицельных параметров $\rho \ll \rho_0$ величина $\beta \ll 1$ и вероятность перехода

$$W(\rho) = B \left(\frac{Ze^2}{\hbar v} \right)^2 \frac{a_B^2}{\rho^2}, \quad B = \frac{2^{17}}{3^{10}} \approx 2,22$$

мала (и, следовательно, теория возмущения применима) вплоть до значений $\rho_0 \sim a_B$. В области больших прицельных параметров $\rho \gg \rho_0$ величина $\beta \gg 1$ и вероятность перехода экспоненциально подавлена. Таким образом, в рассматриваемом случае основной вклад в полное сечение возбуждения σ происходит из области $a_B \ll \rho \ll \rho_0$, в которой

$$d\sigma = W(\rho) 2\pi\rho d\rho = 2B \left(\frac{Ze^2}{\hbar v} \right)^2 \pi a_B^2 \frac{d\rho}{\rho}.$$

Отсюда с логарифмической точностью по параметру $\hbar v/e^2 \gg 1$ сечение равно

$$\sigma \approx 2\pi \int_{a_B}^{\rho_0} W(\rho) \rho d\rho = 2B \left(\frac{Ze^2}{\hbar v} \right)^2 \pi a_B^2 \ln \frac{\hbar v}{e^2}.$$

§ 64. Фотоэффект

Пусть на атом водорода, находящийся в основном состоянии

$$\psi_i(r) = \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}}, \quad a = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

с энергией $E_i = -Ry$, падает плоская монохроматическая волна (рис. 30), описываемая 4-потенциалом

$$\phi = 0, \quad \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} + \mathbf{A}_0^* e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \quad \omega = c|\mathbf{k}|, \quad \mathbf{k}\mathbf{A}_0 = 0.$$

Найдем сечение фотоэффекта, предполагая, что скорость вылетевшего электрона $v = p/m$ велика по сравнению с атомной, но мала по сравнению со скоростью света: $e^2/\hbar \ll v \ll c$. Та-

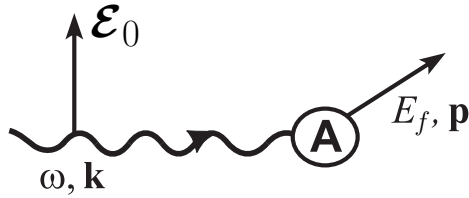


Рис. 30. Кинематика фотоэффекта

кой электрон можно считать свободным, так что его волновая функция

$$\psi_f(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar},$$

а его энергия

$$E_f = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} = \hbar\omega + E_i \approx \hbar\omega.$$

При этом переданный импульс $\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p} - \hbar\mathbf{k} \approx \mathbf{p}$, так как

$$\frac{\hbar k}{p} \approx \frac{p^2}{2mcp} = \frac{v}{2c} \ll 1.$$

Оператор возмущения атома полем

$$\hat{V}(\mathbf{r}, t) = -\frac{e}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\hat{\mathbf{p}}$$

представим в виде (63.7)

$$\hat{V}(\mathbf{r}, t) = \hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{F}^+e^{i\omega t}, \quad \hat{F} = -\frac{e}{mc}\mathbf{A}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}},$$

где оператор \hat{F} определяет вероятность вылета электрона в единицу времени при поглощении кванта поля $\hbar\omega$ (см. (63.10)) с числом конечных состояний $d\nu_f = d^3p/(2\pi\hbar)^3$:

$$dw_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Матричный элемент равен

$$F_{fi} = \frac{ie\hbar}{mc}\mathbf{A}_0 \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \nabla \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}} d^3r \approx -\frac{8e\hbar}{mc} \frac{\sqrt{\pi a^3}}{(pa/\hbar)^4} \frac{\mathbf{p}\mathbf{A}_0}{\hbar}.$$

Преобразуем фазовый объем конечного состояния

$$d^3p = p^2 dp d\Omega = mp dE_f d\Omega,$$

тогда

$$\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) d^3p \rightarrow mp d\Omega.$$

Электрическое поле волны

$$\boldsymbol{\mathcal{E}} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \boldsymbol{\mathcal{E}}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} + \boldsymbol{\mathcal{E}}_0^* e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}$$

имеет амплитуду $\boldsymbol{\mathcal{E}}_0 = i(\omega/c)\mathbf{A}_0$, так что

$$|\mathbf{p}\mathbf{A}_0|^2 = (c/\omega)^2 |\mathbf{p}\boldsymbol{\mathcal{E}}_0|^2.$$

В итоге вероятность вылета электрона в элемент телесного угла $d\Omega$ составляет в единицу времени

$$dw_{i \rightarrow f} = \frac{64}{\pi} \omega_0 \frac{|\mathbf{n}\boldsymbol{\mathcal{E}}_0|^2 a^3}{\hbar\omega} \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{7/2} d\Omega, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{p}}{p}, \quad \omega_0 = \frac{Ry}{\hbar}.$$

Чтобы получить дифференциальное сечение фотоэффекта $d\sigma$, остается разделить $dw_{i \rightarrow f}$ на плотность потока фотонов j_ϕ ,

связанную с величиной усреднённого вектора Пойнтинга S соотношением $S = \hbar\omega j_{\Phi}$. В свою очередь,

$$S = \frac{c}{4\pi} \overline{|\mathbf{E}(t)|^2} = \frac{c}{2\pi} |\mathbf{E}_0|^2$$

(черта сверху означает усреднение по времени). Таким образом, дифференциальное сечение фотоэффекта равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 64\alpha a^2 \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{7/2} \cos^2 \vartheta,$$

где ϑ — угол между направлением вылета электрона \mathbf{p} и вектором электрического поля волны \mathbf{E}_0 . Обращение $d\sigma$ в нуль при $\vartheta = \pi/2$ соответствует классической картине, в которой электрон раскачивается внешним полем и потому вылетает в основном вдоль или против направления вектора электрического поля. Полное сечение фотоэффекта быстро падает с ростом частоты внешнего поля:

$$\sigma = \frac{256\pi}{3} \alpha a^2 \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{7/2}.$$

В водородоподобном ионе с зарядом ядра Ze сечение растёт как Z^5 . При этом Z^2 возникает от квадрата матричного элемента, который пропорционален скорости атомного электрона вблизи ядра, ещё Z^3 — от вероятности нахождения этого электрона вблизи ядра (ясно, что свободный электрон не может поглотить фотон). Сечение фотоэффекта на нейтральных атомах также растёт как Z^5 за счёт вклада ближайшей к ядру оболочки (K -оболочки).

При прохождении фотонов не слишком больших энергий ($\hbar\omega \lesssim 1$ МэВ) через вещество полное сечение их поглощения определяется в основном фотоэффектом.

Задачи

64.1. Найти вероятность ионизации атома водорода под действием электрического поля $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 e^{-|t|/\tau}$ (рассмотреть случай, когда конечный электрон можно считать свободным). *Указание:* для вероятности перехода удобно использовать формулу

$$dW_{fi} = \frac{1}{\hbar^2\omega^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial V_{fi}}{\partial t} e^{i\omega t} dt \right|^2 \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3},$$

в которой

$$\frac{\partial V_{fi}}{\partial t} = \frac{e}{m} \mathbf{E}(t) \mathbf{p}_{fi}.$$

64.2. Вычислить суммарную вероятность возбуждения и ионизации атома водорода, первоначально находящегося в основном состоянии, в результате внезапного “встряхивания”, при котором ядру сообщается скорость V .

64.3. Если при расчете фотоэффекта вместо $-(e/mc)\mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}$ использовать в качестве возмущения $-e\mathbf{r}\mathbf{E}$, то в том же приближении ответ для матричного элемента оказывается вдвое больше приведённого выше. Который из ответов правильный? В чём причина расхождения?

§ 65. Квантование электромагнитного поля

Гамильтониан обычного линейного осциллятора имеет вид

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

а канонические переменные x и p зависят от времени по известному закону:

$$x(t) = b \cos(\omega t + \varphi), \quad p(t) = -m\omega b \sin(\omega t + \varphi),$$

где b — амплитуда, а φ — начальная фаза колебаний. Введём линейные комбинации x и p вида

$$a = \frac{m\omega x + ip}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \quad a^* = \frac{m\omega x - ip}{\sqrt{2m\hbar\omega}}$$

и напомним, что величины a и $i\hbar a^*$ также являются каноническими переменными с простой зависимостью от времени:

$$a(t) \propto b e^{-i(\omega t + \varphi)}, \quad a^*(t) \propto b e^{+i(\omega t + \varphi)}.$$

В этих переменных гамильтониан линейного осциллятора имеет особенно простой вид

$$H = \hbar\omega a^* a.$$

Покажем, что электромагнитное поле в пустоте может быть сведено к набору осцилляторов, описываемых переменными a и a^* .

65.1. Электромагнитное поле как набор осцилляторов

Электрическое \mathcal{E} и магнитное \mathbf{B} поля в пустоте удовлетворяют уравнениям Максвелла:

$$\text{rot } \mathcal{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad \text{div } \mathcal{E} = 0, \quad \text{rot } \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t}, \quad \text{div } \mathbf{B} = 0.$$

Удобно ввести четырёхмерный потенциал

$$A^\mu(\mathbf{r}, t) = (\phi, \mathbf{A}),$$

через который электрическое и магнитное поля выражаются так:

$$\mathcal{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}.$$

Из-за неоднозначности выбора 4-потенциала на него в отсутствие источников поля можно наложить дополнительное условие (так называемая *кулоновская калибровка*):

$$\phi = 0, \quad \text{div } \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0.$$

При этом из уравнения

$$\text{rot } \mathbf{B} = \nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = \nabla(\nabla \mathbf{A}) - \Delta \mathbf{A} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial t} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2}$$

следует, что трехмерный векторный потенциал удовлетворяет волновому уравнению

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \Delta \mathbf{A} = 0.$$

В импульсном представлении, учитывающем в явном виде вещественность векторного потенциала,

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} [\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^*(t) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}] \quad (65.1)$$

амплитуды $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t)$ удовлетворяют осцилляторному уравнению

$$\ddot{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}} + \omega_k^2 \mathbf{A}_{\mathbf{k}} = 0, \quad \omega_k = c|\mathbf{k}|. \quad (65.2)$$

Итак, в каждой моде, т. е. для каждого \mathbf{k} , имеем гармонический осциллятор, канонические переменные которого выражаются через $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}$ и $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}^*$, с той же зависимостью от времени, что у переменных a и a^* :

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t) \propto e^{-i\omega_k t}, \quad \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^*(t) \propto e^{i\omega_k t}. \quad (65.3)$$

Разложение по плоским волнам (1) позволяет говорить об электромагнитном поле как о бесконечном наборе осцилляторов, частоты которых ω_k пробегают непрерывный ряд значений. При квантовании этих осцилляторов возникает квантованное электромагнитное поле. Для придания большей наглядности процедуре квантования удобно перейти к дискретному набору осцилляторов. Для этого рассмотрим поле в конечном объеме

$$\mathcal{V} = L_x L_y L_z$$

и используем условие периодичности поля на границах объема. При этом компоненты волнового вектора (и частоты) становятся дискретными:

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L_x}, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L_y}, \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L_z},$$

где $n_{x,y,z}$ — целые (положительные и отрицательные) числа, а плоские волны удовлетворяют условию ортогональности вида

$$\int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} d^3r = \mathcal{V} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}. \quad (65.4)$$

В итоге вместо разложения в интеграл Фурье (1) возникает разложение в ряд Фурье

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} [\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^*(t) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}], \quad (65.5)$$

где новые амплитуды $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t)$ удовлетворяют тем же соотношениям (2)–(3), что и раньше. Разложение, подобное (5), можно написать и для полей $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$, причем амплитуды этих полей в силу уравнений

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$$

связаны с амплитудами векторного потенциала соотношениями

$$\mathcal{E}_{\mathbf{k}} = \frac{i\omega_{\mathbf{k}}}{c} \mathbf{A}_{\mathbf{k}}, \quad \mathbf{B}_{\mathbf{k}} = i\mathbf{k} \times \mathbf{A}_{\mathbf{k}}.$$

Из условия $\text{div } \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = 0$ или

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{k}} = 0 \quad (65.6a)$$

следует, что вектор $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}$ лежит в плоскости, ортогональной волновому вектору \mathbf{k} , т. е. имеет лишь две независимые компоненты. Две степени свободы осциллятора соответствуют поперечности свободных электромагнитных волн в вакууме. Введем два вектора поляризации $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}$, где индекс λ пробегает два

значения. Например, для циркулярно поляризованной волны с волновым вектором $\mathbf{k} = (0, 0, k)$ векторы поляризации имеют вид

$$\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda} = -\frac{\lambda}{\sqrt{2}} (1, i\lambda, 0),$$

где $\lambda = \pm 1$ соответствуют правой (левой) циркулярной поляризации. Векторы поляризации удовлетворяют условиям поперечности (6a)

$$\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda} = 0, \quad (65.6b)$$

взаимной ортогональности

$$\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}^* \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'} \quad (65.7)$$

и полноты

$$\sum_{\lambda} (\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda})_i (\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}^*)_j = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{\mathbf{k}^2} \quad (65.8)$$

(здесь i, j — компоненты вектора поляризации; справа стоит единичный тензор в плоскости, ортогональной вектору \mathbf{k}).

Разложим вектор $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t)$ по векторам поляризации

$$\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t) = C_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda} a_{\mathbf{k}\lambda}(t) \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}$$

и выберем нормировочный множитель $C_{\mathbf{k}}$ таким образом, чтобы энергия поля свелась к сумме осцилляторных энергий:

$$E = \int \frac{\mathcal{E}^2 + \mathbf{B}^2}{8\pi} d^3r = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\lambda}^* a_{\mathbf{k}\lambda}. \quad (65.9)$$

Для этого представим \mathcal{E}^2 в виде двойной суммы

$$\mathcal{E}^2 = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \boldsymbol{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}^*(t) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}] [\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}'}(t) e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}} + \boldsymbol{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}'}^*(t) e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}}]$$

и проведем интегрирование по \mathbf{r} , используя (4):

$$\int \mathcal{E}^2 d^3r = \mathcal{V} \sum_{\mathbf{k}} [\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}(t) \boldsymbol{\mathcal{E}}_{-\mathbf{k}}(t) + \boldsymbol{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}^*(t) \boldsymbol{\mathcal{E}}_{-\mathbf{k}}^*(t) + 2\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}(t) \boldsymbol{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}^*(t)].$$

Зависящие от времени слагаемые

$$\mathcal{E}_{\mathbf{k}}(t) \mathcal{E}_{-\mathbf{k}}(t) \propto e^{-2i\omega_{\mathbf{k}}t}, \quad \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^*(t) \mathcal{E}_{-\mathbf{k}}^*(t) \propto e^{2i\omega_{\mathbf{k}}t}$$

сокращаются, а не зависящие от времени слагаемые

$$2\mathcal{E}_{\mathbf{k}}(t) \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^*(t)$$

удваиваются при учёте вклада магнитного поля $\int \mathbf{B}^2 d^3r$. В итоге получаем:

$$E = \frac{\mathcal{V}}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_{\mathbf{k}}(t) \mathcal{E}_{\mathbf{k}}^*(t) = \frac{\mathcal{V}}{2\pi} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\omega_{\mathbf{k}}^2}{c^2} |C_{\mathbf{k}}|^2 a_{\mathbf{k}\lambda}^* a_{\mathbf{k}\lambda}.$$

Отсюда видно, что при выборе нормировочного множителя в виде

$$C_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}} \mathcal{V}}},$$

т. е. при использовании разложения

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}} \mathcal{V}}} [a_{\mathbf{k}\lambda}(t) \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + a_{\mathbf{k}\lambda}^*(t) \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}] \quad (65.10)$$

энергия поля действительно сводится к сумме осцилляторных энергий (9), а энергия каждой моды колебаний с заданной поляризацией λ равна

$$E_{\mathbf{k}\lambda} = \hbar\omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\lambda}^* a_{\mathbf{k}\lambda}. \quad (65.11)$$

Совершенно аналогично можно показать, что выражение для полного импульса поля

$$\mathbf{P} = \int \frac{\boldsymbol{\mathcal{E}} \times \mathbf{B}}{4\pi c} d^3r$$

сводится к сумме соответствующих импульсов для каждой моды колебаний

$$\mathbf{P} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\mathbf{k} a_{\mathbf{k}\lambda}^* a_{\mathbf{k}\lambda}, \quad (65.12)$$

а импульс отдельной моды с заданной поляризацией λ равен

$$\hbar\mathbf{k} a_{\mathbf{k}\lambda}^* a_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{\mathbf{k}}{k} \frac{E_{\mathbf{k}\lambda}}{c}.$$

65.2. Квантование поля

Напомним, что при квантовании обычного осциллятора зависящие от времени классические величины $a(t)$ и $a^*(t)$ становятся операторами уничтожения \hat{a} и рождения \hat{a}^+ кванта с энергией $\hbar\omega$, для которых справедливы перестановочные соотношения

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1. \quad (65.13)$$

При этом сами операторы в обычном шрёдингеровском представлении не зависят от времени, а временная зависимость определяется волновыми функциями. Классический гамильтониан H становится оператором Шрёдингера

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

При использовании перестановочных соотношений (13) оператор \hat{H} приводится к виду

$$\hat{H} = \hbar\omega (\hat{n} + \frac{1}{2}), \quad \hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a},$$

где \hat{n} — оператор числа квантов, собственные значения которого суть целые числа $n = 0, 1, 2, \dots$

Аналогично при квантовании электромагнитного поля величины $a_{\mathbf{k}\lambda}^*(t)$ и $a_{\mathbf{k}\lambda}(t)$ становятся операторами рождения $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+$ и уничтожения $\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}$ кванта, соответствующего фотону с энергией $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$, импульсом $\hbar\mathbf{k}$ и поляризацией λ , а векторный потенциал (10) становится не зависящим от времени оператором

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}} \mathcal{V}}} (\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+ \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}). \quad (65.14)$$

Поля $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$ и $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ также становятся операторами

$$\hat{\mathcal{E}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{i\omega_k}{c} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k \mathcal{V}}} (\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+ \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}), \quad (65.15)$$

$$\hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k \mathcal{V}}} i\mathbf{k} \times (\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+ \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}),$$

а выражения для энергии и импульса электромагнитного поля становятся суммами операторов Шрёдингера и операторов импульса для отдельных фотонов:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{H}_{\mathbf{k}\lambda}, \quad \hat{H}_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{1}{2} \hbar\omega_k (\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+),$$

$$\hat{\mathbf{P}} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\mathbf{k}}{k} \frac{\hat{H}_{\mathbf{k}\lambda}}{c}. \quad (65.16)$$

При использовании перестановочных соотношений

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}, \hat{a}_{\mathbf{k}'\lambda'}^+] = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}, \quad [\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}, \hat{a}_{\mathbf{k}'\lambda'}] = [\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+, \hat{a}_{\mathbf{k}'\lambda'}^+] = 0 \quad (65.17)$$

оператор $\hat{H}_{\mathbf{k}\lambda}$ приводится к виду

$$\hat{H}_{\mathbf{k}\lambda} = \hbar\omega_k \left(\hat{n}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right), \quad \hat{n}_{\mathbf{k}\lambda} = \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}, \quad (65.18)$$

где $\hat{n}_{\mathbf{k}\lambda}$ — оператор числа квантов, собственные значения которого суть целые числа $n_{\mathbf{k}\lambda} = 0, 1, 2, \dots$. Можно также показать, что правой (левой) поляризации фотона соответствует его спиральность, равная $\pm\hbar$.

65.3. Рождение и уничтожение квантов поля

Пусть $|n_{\mathbf{k}\lambda}, t\rangle$ — состояние поля, содержащее $n_{\mathbf{k}\lambda}$ фотонов с энергией $\hbar\omega_k$, импульсом $\hbar\mathbf{k}$ и поляризацией λ каждый. Так как

$$\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+ |n_{\mathbf{k}\lambda}, t\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1} |n_{\mathbf{k}\lambda} + 1, t\rangle e^{i\omega_k t},$$

$$\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} |n_{\mathbf{k}\lambda}, t\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda}} |n_{\mathbf{k}\lambda} - 1, t\rangle e^{-i\omega_k t},$$

то из (14) или (15) видно, что при действии оператора $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$ или оператора $\hat{\mathcal{E}}(\mathbf{r})$ на начальное состояние поля может происходить излучение или поглощение одного фотона. Таким образом, матричные элементы оператора $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})$ равны:

при излучении фотона

$$\langle n_{\mathbf{k}\lambda} + 1, t | \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) | n_{\mathbf{k}\lambda}, t \rangle = \mathbf{A}_{fi}(\mathbf{r}) e^{i\omega_k t},$$

$$\mathbf{A}_{fi}(\mathbf{r}) = \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k \mathcal{V}}} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (65.19)$$

при поглощении фотона

$$\langle n_{\mathbf{k}\lambda} - 1, t | \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) | n_{\mathbf{k}\lambda}, t \rangle = \mathbf{A}_{fi}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_k t},$$

$$\mathbf{A}_{fi}(\mathbf{r}) = \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k \mathcal{V}}} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (65.20)$$

Излучение какой-либо системы зарядов (например, атома) может происходить в условиях, когда начальное состояние электромагнитного поля не содержит фотонов, т. е. $n_{\mathbf{k}\lambda} = 0$ (такое излучение называют *спонтанным*), или в в условиях, когда в начальном состоянии поля уже имеется $n_{\mathbf{k}\lambda}$ фотонов (такое излучение называют *вынужденным*). Вероятность излучения пропорциональна квадрату модуля матричного элемента (19). Обратим внимание на то, что вероятность вынужденного излучения оказывается в $(n_{\mathbf{k}\lambda} + 1)$ раз больше, чем вероятность спонтанного излучения. Этот факт является фундаментальным для физики лазеров.

Пример:

Линейно поляризованный свет проходит через оптически активную среду, вращающую его плоскость поляризации. Оценим

минимальное число квантов, необходимое для регистрации малого угла поворота φ плоскости поляризации.

Угол φ совпадает (с точностью до множителя $1/2$) с разностью фаз циркулярных составляющих линейно поляризованной волны, которая возникает при прохождении волны через среду. Эта разность должна быть не меньше неопределенности $\Delta\varphi$. Величиной, канонически сопряженной углу φ , является действие, равное $\hbar N$, где N — число квантов. Поэтому неопределенность $\Delta\varphi$ связана с неопределенностью числа квантов ΔN соотношением $\Delta\varphi \cdot \Delta N \gtrsim 1$. Учитывая, что $\Delta N \sim \sqrt{N}$, получаем:

$$N \gtrsim \frac{1}{\varphi^2}.$$

Полученному результату можно придать такую интерпретацию. Пусть волна распространяется вдоль оси z , а начальная поляризация направлена вдоль оси x . В этом случае амплитуда электрического поля $\mathcal{E}_{x0} \propto \sqrt{\hbar\omega N}$. При повороте плоскости поляризации на малый угол φ появляется y составляющая электрического поля. Минимальное значение ее амплитуды, соответствующее регистрации одного фотона, равно $\mathcal{E}_{y0} \propto \sqrt{\hbar\omega}$. Поэтому оценка для угла поворота такова: $\varphi \sim \mathcal{E}_{y0}/\mathcal{E}_{x0} \sim 1/\sqrt{N}$. Отсюда следует та же оценка для N .

§ 66. Испускание и поглощение света

66.1. Спонтанное и вынужденное излучение

Пусть атом из состояния ψ_i переходит в состояние ψ_f и излучает фотон с энергией $\hbar\omega = E_i - E_f$, импульсом $\hbar\mathbf{k}$ и поляризацией $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}$. Для системы атом + электромагнитное поле это есть переход из начального состояния

$$\psi_i | n_{\mathbf{k}\lambda} \rangle$$

в конечное состояние

$$\psi_f | n_{\mathbf{k}\lambda} + 1 \rangle$$

под действием возмущения

$$\hat{V} = -\frac{e}{cm} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}}, \quad (66.1)$$

где оператор $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \propto e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ определен в (65.14). Так как в нашем случае

$$kr \sim \frac{\omega}{c} a_B \sim \frac{v_{ат}}{c} \ll 1,$$

то зависимостью векторного потенциала от \mathbf{r} можно пренебречь: $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \approx \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{0})$, после чего матричный элемент оператора возмущения \hat{V} принимает вид

$$V_{fi} = -\frac{e}{cm} \mathbf{A}_{fi}(0) \mathbf{p}_{fi}, \quad (66.2)$$

где $\mathbf{A}_{fi}(\mathbf{r})$ определен в (75.19).

Пусть далее \hat{H} — гамильтониан атома, тогда

$$\mathbf{p}_{fi} = m\dot{\mathbf{r}}_{fi} = m\frac{i}{\hbar} \langle \psi_f | \hat{H}\mathbf{r} - \mathbf{r}\hat{H} | \psi_i \rangle = -im\omega\mathbf{r}_{fi}, \quad (66.3)$$

что позволяет представить (2) как матричный элемент оператора

$$\hat{V} = -e\mathbf{r}\hat{\boldsymbol{\mathcal{E}}}, \quad (66.4)$$

где оператор электрического поля $\hat{\boldsymbol{\mathcal{E}}}(\mathbf{r})$ определен в (65.15). До сих пор мы рассматривали взаимодействие одного электрона. Обобщение на случай более сложного атома очевидно, достаточно заменить $e\mathbf{r}$ на дипольный момент системы:

$$e\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{d} = \sum_a e_a \mathbf{r}_a. \quad (66.5)$$

Это так называемое *дипольное приближение* (излученные в этом случае фотоны называются электрическими дипольными или $E1$ фотонами).

Используя (2) и (63.12), получим вероятность излучения атомом фотона в телесный угол $d\Omega$ в единицу времени в виде

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(\hbar\omega + E_f - E_i) \frac{\mathcal{V} d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{\mathcal{V}\omega^2}{(2\pi\hbar)^2 c^3} |V_{fi}|^2 d\Omega$$

или (после подстановки (65.8) и (3), (5)) в виде

$$dw_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |\mathbf{d}_{fi} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}^*|^2 (n_{\mathbf{k}\lambda} + 1) d\Omega \quad (66.6)$$

(при этом вспомогательная величина — объём \mathcal{V} — исчезла из конечного результата). Обратим внимание на то, что вероятность излучения (6) пропорциональна множителю $(n_{\mathbf{k}\lambda} + 1)$, который определяется числом квантов в падающей волне. Как уже отмечалось в § 65, излучение может происходить и тогда,

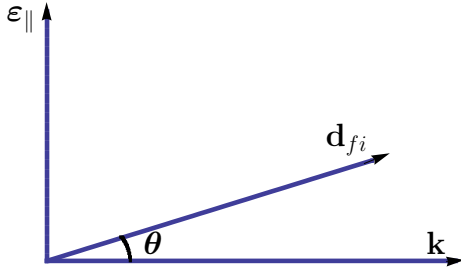


Рис. 31. Векторы, описывающие излучение ($\boldsymbol{\varepsilon}_{\parallel}$ — составляющая вектора поляризации, лежащая в плоскости векторов \mathbf{k} и \mathbf{d}_{fi})

когда начальное состояние поля не содержит фотонов, т. е. при $n_{\mathbf{k}\lambda} = 0$, это так называемое *спонтанное излучение*. При $n_{\mathbf{k}\lambda} \geq 1$ имеет место *индуцированное или вынужденное излучение*. Из формулы (6) и рис. 31 видно, что работает лишь компонента вектора поляризации, лежащая в той же плоскости, что и векторы \mathbf{k} и \mathbf{d}_{fi} .

66.2. Угловое распределение и интенсивность спонтанного дипольного излучения

После суммирования по поляризациям фотона (для этого удобно использовать формулу (65.8)) получим угловое распределение излученных фотонов и полную вероятность излучения в единицу времени:

$$\frac{dw_{\mathbf{k}}}{d\Omega} = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} \left| \mathbf{d}_{fi} \times \frac{\mathbf{k}}{k} \right|^2, \quad w_{i \rightarrow f} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2. \quad (66.7)$$

Если $\mathbf{d}_{fi} \propto (0, 0, 1)$, то

$$\frac{dw_{\mathbf{k}}}{d\Omega} \propto \sin^2 \theta,$$

где θ — полярный угол вылета фотона. Это распределение соответствует классическому излучению заряженной частицы, колеблющейся вдоль оси z .

Если $\mathbf{d}_{fi} \propto (1, \pm i, 0)$, то

$$\frac{dw_{\mathbf{k}}}{d\Omega} \propto 1 + \cos^2 \theta,$$

что соответствует классическому излучению заряженной частицы, вращающейся в плоскости xy .

Интенсивность излучения I получается умножением полной вероятности излучения на энергию фотона $\hbar\omega$:

$$I = \hbar\omega w = \frac{4\omega^4}{3c^3} |\mathbf{d}_{fi}|^2. \quad (66.8)$$

Простая полуклассическая оценка такова. Классическая интенсивность дипольного излучения составляет

$$I \sim \frac{e^2}{c^3} \ddot{\mathbf{r}}^2 \sim \frac{e^2 \omega^4 r^2}{c^3}.$$

Соответственно число квантов, испущенных в единицу времени (т. е. вероятность испускания кванта в единицу времени), равно

$$w = \frac{I}{\hbar\omega} \sim e^2 \frac{\omega^3}{\hbar c^3} r^2 \sim \alpha \frac{\omega^3}{c^2} r^2.$$

Если $\omega r \sim v_{\text{ат}} \sim \alpha c$, то для ширины уровня $\Gamma = \hbar w$ получаем оценку

$$\Gamma \sim \alpha^3 \hbar \omega.$$

Оценка для времени жизни такова:

$$\tau = \frac{1}{w} \sim \frac{1}{\alpha^3 \omega}.$$

В следующем порядке по v/c возникают магнитные дипольные $M1$ и электрические квадрупольные $E2$ переходы. Оператор $M1$ перехода равен (ср. (4), (5))

$$\hat{V} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \hat{\mathbf{B}}(0) = -\frac{e\hbar}{2mc}(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \hat{\mathbf{B}}(0).$$

Его амплитуда в $\mu/(ea_B) \sim \alpha$ раз меньше, чем у $E1$ перехода.

66.3. Правила отбора

Пусть атом излучает фотон, переходя из начального состояния с моментом импульса J_i , проекцией M_i и чётностью P_i в конечное состояние с квантовыми числами J_f , M_f , P_f . Рассмотрим два важных частных случая.

Правила отбора для электрического дипольного, или $E1$, перехода определяются матричным элементом $\langle f | \mathbf{d} | i \rangle$ (см. § 39): чётность изменяется, $P_f = -P_i$ (так как вектор \mathbf{d} является полярным (или истинным) вектором); $\Delta J = J_f - J_i = \pm 1, 0$; запрещён $J_i = 0 \rightarrow J_f = 0$ переход; для одноэлектронных конфигураций запрещен по чётности переход с $\Delta l = l_f - l_i = 0$.

Правила отбора по проекции момента импульса таковы: \mathcal{E}_z вызывает переходы с $\Delta M = M_f - M_i = 0$, $\mathcal{E}_{x,y}$ или \mathcal{E}_{\pm} — переходы с $\Delta M = \pm 1$.

Правила отбора для $M1$ переходов: не изменяются чётность, $P_f = P_i$ (так как вектор $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ является аксиальным вектором) и радиальные квантовые числа; $\Delta J = \pm 1, 0$; запрещён $J_i = 0 \rightarrow J_f = 0$ переход. В одноэлектронных конфигурациях переход происходит лишь между компонентами тонкой структуры (например, $p_{3/2} \rightarrow p_{1/2}$).

66.4. Поглощение света

Рассмотрим процесс, обратный излучению, — поглощение света. Пусть атом из состояния ψ_f переходит в состояние ψ_i и поглощает фотон с энергией $\hbar\omega = E_i - E_f$, импульсом $\hbar\mathbf{k}$ и поляризацией $\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}$. Для системы атом + электромагнитное поле это переход из начального состояния $\psi_f | n_{\mathbf{k}\lambda} \rangle$ в конечное состояние $\psi_i | n_{\mathbf{k}\lambda} - 1 \rangle$ под действием возмущения (1). Повторяя далее выкладки, аналогичные случаю излучения, мы получим, что квадрат матричного элемента возмущения $|V_{fi}|^2$, а с ним и полная вероятность поглощения света в единицу времени $w_{f \rightarrow i}^{\text{пог}}$, отличаются от соответствующих величин для излучения лишь заменой множителя $n_{\mathbf{k}\lambda} + 1$ на множитель $n_{\mathbf{k}\lambda}$. В итоге

$$\frac{w_{f \rightarrow i}^{\text{пог}}}{w_{i \rightarrow f}^{\text{изл}}} = \frac{n_{\mathbf{k}\lambda}}{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1}.$$

Задачи

66.1. а) Излучение при переходе $2p, m \rightarrow 1s$ для атома водорода. Определить $dw/d\Omega$, w , τ , Γ , поляризацию излучённого фотона.

б) Как изменится этот ответ при наличии нескольких фотонов с частотой, равной частоте перехода, в начальном состоянии электромагнитного поля?

66.2. В начальном состоянии атома $n \gg 1$, $n - l \ll n$. Найти приближенные правила отбора по n и по l для электромагнитных переходов.

66.3. Найти время жизни первого возбуждённого уровня заряженного сферического осциллятора.

66.4. Указать возможные дипольные переходы между уровнями $n = 3$ и $n = 2$ (α -линия серии Бальмера) с учетом их тонкой структуры (по Дираку и по Клейну – Фоку – Гордону).

66.5. В начальном состоянии $ns_{1/2}$ атом поляризован. Как выглядит угловая зависимость вероятности излучения, просуммированной по поляризациям фотона и конечного состояния атома?

66.6. Оценки вероятностей переходов между компонентами сверхтонкой структуры основного состояния атома водорода.

66.7. Атом водорода находится в постоянном однородном магнитном поле \mathbf{B} . Рассмотреть переходы $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2} + \gamma$. Каковы поляризации и частоты фотонов, летящих: а) вдоль поля, б) перпендикулярно полю, если энергия взаимодействия с полем мала или велика по сравнению с интервалами тонкой структуры? Каковы относительные интенсивности спектральных линий?

66.8. Свободный нейтрон находится в постоянном однородном магнитном поле \mathbf{B} в состоянии с определённым значением проекции спина на направление магнитного поля. Найти вероятность излучения фотона в единицу времени в результате переворота спина нейтрона.

66.9. Найти угловое распределение фотонов в распадах по-

ляризованных частиц:

$$\begin{aligned} \text{а) } & \omega^0(J^P = 1^-) \rightarrow \pi^0(0^-) + \gamma, \\ \text{б) } & A_1(1^+) \rightarrow \pi(0^-) + \gamma. \end{aligned}$$

§ 67. Лэмбовский сдвиг

Нетрудно убедиться в том, что операторы электрического и магнитного полей не коммутируют с операторами чисел заполнения и энергии поля. Поэтому в вакууме электромагнитного поля, т. е. в состоянии с наименьшей энергией и нулевыми числами заполнения, поля не равны нулю, а флуктуируют вокруг нуля. Пусть $|0\rangle$ — вакуумное состояние электромагнитного поля. Используя операторы поля (65.15) и перестановочные соотношения (65.17), нетрудно получить, что для этого состояния средние значения полей \mathcal{E} и \mathbf{B} равны нулю,

$$\langle 0 | \hat{\mathcal{E}}(\mathbf{r}) | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) | 0 \rangle = 0,$$

а средние значения квадратов полей отличны от нуля:

$$\langle 0 | \hat{\mathcal{E}}^2(\mathbf{r}) | 0 \rangle = \langle 0 | \hat{\mathbf{B}}^2(\mathbf{r}) | 0 \rangle = \frac{4\pi}{\mathcal{V}} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar\omega_k}{2} \quad (67.1)$$

(здесь \mathcal{V} — объём, в котором заключено поле). Формула (1) соответствует тому, что в состоянии вакуума электромагнитного поля его энергия E выражается в виде суммы энергий нулевых колебаний отдельных мод:

$$E = \frac{1}{8\pi} \int d^3r \langle 0 | \hat{\mathcal{E}}^2(\mathbf{r}) + \hat{\mathbf{B}}^2(\mathbf{r}) | 0 \rangle = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\hbar\omega_k}{2}. \quad (67.2)$$

Электрон в атоме водорода взаимодействует не только с кулоновским полем ядра, определяемым потенциальной энергией $U(r) = -e^2/r$, но и с нулевыми флуктуациями вакуума, что

приводит к наблюдаемым эффектам. Пусть $\boldsymbol{\rho}$ — малая флуктуация координаты электрона, вызванная вакуумным электрическим полем (влиянием магнитного поля для нерелятивистского электрона можно пренебречь). Из уравнения движения

$$m\ddot{\boldsymbol{\rho}} = e\boldsymbol{\mathcal{E}} + \frac{e}{c}\boldsymbol{\rho} \times \mathbf{B} \approx e\boldsymbol{\mathcal{E}}$$

для фурье-компоненты флуктуационного смещения следует соотношение

$$\boldsymbol{\rho}_{\mathbf{k}} = -\frac{e}{m\omega_{\mathbf{k}}^2}\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}. \quad (67.3)$$

Учет этих флуктуаций координаты приводит к изменению энергии кулоновского взаимодействия:

$$U(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) = U(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\rho} \nabla U(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \rho_i \rho_j \nabla_i \nabla_j U(\mathbf{r}) + \dots \quad (67.4)$$

В классическом подходе компоненты $\boldsymbol{\mathcal{E}}_{\mathbf{k}}$ — осциллирующие функции времени, что позволяет провести далее усреднение флуктуирующих смещений по времени и получить флуктуационную поправку к кулоновскому взаимодействию. Конечно, основной вклад при этом будет соответствовать частотам поля, которые заметно больше атомных частот, но заведомо меньше частот соответствующих релятивистским энергиям, т. е. основной областью частот является интервал

$$\omega_{\text{ат}} \ll \omega_{\mathbf{k}} \ll mc^2/\hbar. \quad (67.5)$$

Для квантованного поля уравнение (3) является операторным соотношением

$$\hat{\boldsymbol{\rho}}_{\mathbf{k}} = -\frac{e}{m\omega_{\mathbf{k}}^2}\hat{\boldsymbol{\mathcal{E}}}_{\mathbf{k}},$$

из которого для оператора смещения получаем:

$$\hat{\boldsymbol{\rho}} = -i\frac{e}{m} \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{\mathbf{k}}\mathcal{V}}} (\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}). \quad (67.6)$$

Теперь нетрудно найти, что

$$\langle 0 | \hat{\boldsymbol{\rho}} | 0 \rangle = 0, \quad \langle 0 | \hat{\rho}_i \hat{\rho}_j | 0 \rangle = \frac{1}{3} \delta_{ij} \langle 0 | \boldsymbol{\rho}^2 | 0 \rangle,$$

$$\langle 0 | \boldsymbol{\rho}^2 | 0 \rangle = \frac{4\pi\alpha}{\mathcal{V}} \lambda^2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{c^3}{\omega_{\mathbf{k}}},$$

где $\lambda = \hbar/(mc) = 3,86 \cdot 10^{-11}$ см — приведённая комптоновская длина волны электрона. Переходя от суммирования по отдельным модам поля к интегрированию

$$\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int \frac{\mathcal{V} d^3k}{(2\pi)^3},$$

получим (при этом из ответа исчезнет объём поля \mathcal{V})

$$\langle 0 | \boldsymbol{\rho}^2 | 0 \rangle = \frac{2\alpha}{\pi} \lambda^2 \int_{\omega_{\min}}^{\omega_{\max}} \frac{d\omega_{\mathbf{k}}}{\omega_{\mathbf{k}}} = \frac{4\alpha}{\pi} \lambda^2 \ln \frac{1}{\alpha}.$$

В качестве пределов логарифмического интеграла выбираем $\omega_{\min} \sim \omega_{\text{ат}} = \alpha^2 mc^2/\hbar$ и $\omega_{\max} \sim mc^2/\hbar$ в соответствии с (5).

Среднее по вакууму от потенциала (4) равно

$$\langle 0 | U(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) | 0 \rangle = U(\mathbf{r}) + \delta U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) + \frac{1}{6} \langle 0 | \boldsymbol{\rho}^2 | 0 \rangle \Delta U(\mathbf{r}),$$

а флуктуационная поправка к потенциальной энергии (с учетом того, что $\Delta U(\mathbf{r}) = 4\pi e^2 \delta(\mathbf{r})$) составляет

$$\delta U(\mathbf{r}) = \frac{2\pi}{3} e^2 \delta(\mathbf{r}) \langle 0 | \boldsymbol{\rho}^2 | 0 \rangle.$$

В результате оператор возмущения равен

$$\delta U(\mathbf{r}) = \frac{8}{3} \alpha \left(\ln \frac{1}{\alpha} \right) e^2 \lambda^2 \delta(\mathbf{r}).$$

Поправка к энергии (в этом приближении она возникает лишь для s -состояния) составляет

$$\delta E_n = \frac{8}{3} \alpha \left(\ln \frac{1}{\alpha} \right) e^2 \lambda^2 |\psi_n(0)|^2 = \frac{16}{3\pi} \alpha^3 \left(\ln \frac{1}{\alpha} \right) \frac{\text{Ry}}{n^3}.$$

Уровень $2s_{1/2}$ сдвигается вверх на

$$\delta E_2 = \frac{2\alpha^3}{3\pi} \left(\ln \frac{1}{\alpha} \right) \text{ Ry}.$$

Таким образом, снимается последнее вырождение в атоме водорода. Аномальный магнитный момент электрона, примерно равный $(\alpha/2\pi)\mu_B$, даёт вклад в обсуждаемый сдвиг уровней порядка $(\alpha/2\pi)\alpha^2 \sim (\alpha^3/\pi)$, что примерно на порядок меньше полученного значения. Более точный расчёт, проводимый в квантовой электродинамике, даёт для смещения уровня $2s_{1/2}$ величину

$$\delta E_2 = \frac{2\alpha^3}{3\pi} \left(\ln \frac{1}{\alpha} - 1,089 \right) \text{ Ry} = 1034 \text{ МГц},$$

а для расщепления уровней $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ — величину

$$E_{2s_{1/2}} - E_{2p_{1/2}} = 1057,91 \pm 0,01 \text{ МГц}$$

в полном согласии с экспериментальным значением $1057,90 \pm 0,06$ МГц.

В водородоподобных ионах лэмбовский сдвиг растёт как Z^4 . Один множитель Z возникает от неэкранированного кулоновского потенциала ядра и Z^3 — от $|\psi(0)|^2$.

Задача

67.1. Найти с логарифмической точностью (т. е. считая $\ln(1/\alpha) \gg 1$) поправку к кулоновскому взаимодействию двух частиц, обусловленную флуктуациями вакуума электромагнитного поля. Рассмотреть следующие случаи:

- позитроний;
- электроны в атоме гелия;
- поправка первого порядка по m/M в атоме водорода.

§ 68. Рассеяние света

Для определённости рассмотрим рассеяние света на атоме водорода в условиях, когда длина волны света много больше размеров атома: $\lambda \gg a_B$. Взаимодействие атома с электромагнитным полем в первом порядке описывается оператором возмущения (66.4): $\hat{V} = -e\mathbf{r} \hat{\mathcal{E}}(0)$, где оператор электрического поля $\hat{\mathcal{E}}(\mathbf{r})$ определён в (65.15). В первом порядке возможны только процессы испускания и поглощения света. Рассеяние света возникает во втором порядке, когда атом поглощает (или испускает) фотон с импульсом $\hbar\mathbf{k}$, переходя из начального состояния ψ_i^0 в промежуточное состояние ψ_n^0 , а затем атом испускает (или поглощает) фотон с импульсом $\hbar\mathbf{k}'$, переходя в конечное состояние ψ_f^0 . Рассмотрим подробнее процесс упругого рассеяния света, когда $\psi_i^0 = \psi_f^0 = \psi_{100}(\mathbf{r})$. Учитывая эти две возможности, запишем эффективный матричный элемент процесса M_{fi} (см. (63.13)), в котором энергия начального состояния системы атом + электромагнитное поле $E_i^0 + \hbar\omega$ совпадает с энергией конечного состояния системы $E_f^0 + \hbar\omega'$, а энергия промежуточного состояния равна E_n^0 :

$$M_{fi} = \sum_n \left(\frac{V'_{fn} V_{ni}}{E_i^0 + \hbar\omega - E_n^0} + \frac{V_{fn} V'_{ni}}{E_i^0 - \hbar\omega - E_n^0} \right).$$

Здесь V_{ni} — матричный элемент оператора возмущения, соответствующий поглощению фотона с импульсом $\hbar\mathbf{k}$, а V'_{fn} — матричный элемент того же оператора, соответствующий испусканию фотона с импульсом $\hbar\mathbf{k}'$ и т. д.

Учитывая формулы (66.4) и (65.15), получим следующую оценку:

$$M_{fi} \sim \left(\sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega\mathcal{V}}} \cdot \frac{\omega}{c} \right)^2 e^2 \left(\frac{|\mathbf{r}_{ni}|^2}{\Delta E - \hbar\omega} + \frac{|\mathbf{r}_{ni}|^2}{\Delta E + \hbar\omega} \right) \sim$$

$$\sim 2\pi e^2 a_B^2 \left(\frac{\hbar\omega}{\Delta E - \hbar\omega} + \frac{\hbar\omega}{\Delta E + \hbar\omega} \right),$$

где $\Delta E = E_n^0 - E_i^0$. При квантовании поля предполагалась нормировка на один фотон во всем пространстве, поэтому плотность потока фотонов $j_\Phi = c/\mathcal{V}$, а энергетическая плотность конечных состояний

$$\varrho = \int \delta(E_f + \hbar\omega' - E_i - \hbar\omega) 2 \frac{\mathcal{V} d^3 k'}{(2\pi)^3} \sim \mathcal{V} \frac{\omega^2}{\pi^2 \hbar c^3}.$$

Так как сечение рассеяния равно

$$d\sigma = \frac{dw_{i \rightarrow f}}{j_\Phi},$$

где вероятность $dw_{i \rightarrow f}$ рассчитывается согласно (63.13), то в итоге получаем следующую оценку:

$$\sigma \sim \frac{2\pi |M_{fi}|^2 \varrho}{\hbar j_\Phi} \sim \pi (\alpha a_B)^2 \left(\frac{\omega a_B}{c} \right)^2 \left(\frac{\hbar\omega}{\Delta E + \hbar\omega} + \frac{\hbar\omega}{\Delta E - \hbar\omega} \right)^2.$$

В случае малых частот $\hbar\omega \ll \Delta E \sim \hbar\omega_{\text{ат}}$ получаем *рэлеевское сечение*

$$\sigma \sim \pi r_e^2 \left(\frac{\omega}{\omega_{\text{ат}}} \right)^4,$$

где $r_e = \alpha^2 a_B = e^2/(mc^2)$ — классический радиус электрона.

В случае больших частот $\hbar\omega \gg \Delta E$ получаем *томсоновское сечение*

$$\sigma \sim \pi (\alpha a_B)^2 \left(\frac{\omega a_B}{c} \right)^2 \left(\frac{\hbar\omega_{\text{ат}}}{\hbar\omega} \right)^2 \sim \pi r_e^2.$$

В резонансном случае, $\hbar\omega = \Delta E = E_n^0 - E_i^0$, нужно учесть ширину промежуточного состояния:

$$E_n^0 \rightarrow E_n^0 - \frac{i}{2} \Gamma, \quad \Gamma \sim \alpha^3 \hbar\omega.$$

Тогда получим характерное резонансное сечение:

$$\sigma \sim \pi a_B^2 \alpha^4 \left(\frac{\hbar\omega}{\Gamma} \right)^2 \sim \pi \frac{a_B^2}{\alpha^2} \sim \pi \lambda^2,$$

где $\lambda \sim a_B/\alpha = c/\omega_{\text{ат}}$ порядка длины волны падающего света.

Задача

68.1. Найти дифференциальное и полное сечение рассеяния фотонов сферическим ротатором, находящимся в основном состоянии. Ротатор имеет момент инерции I и электрический дипольный момент \mathbf{d} , направленный вдоль оси ротатора.

§ 69. Молекулы

Малость отношения масс электрона и ядра m/M обеспечивает применимость адиабатического приближения — рассмотрения движения электронов при фиксированных координатах ядер \mathbf{R}_i . Энергия электронов E параметрически зависит от \mathbf{R}_i , что позволяет рассматривать $E(\mathbf{R}_i)$ как потенциал для ядер.

Соотношение электронных, колебательных и вращательных частот

$$\omega_{\text{elect}} : \omega_{\text{osc}} : \omega_{\text{rot}} \sim 1 : \sqrt{\frac{m}{M}} : \frac{m}{M}$$

служит количественным оправданием адиабатического приближения (см. [1], § 78).

Задача

68.1. Найти прямым вариационным методом потенциальную кривую $U(R)$ иона H_2^+ . В качестве пробной функции выбрать

$$\psi_g(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = C_+(\mathbf{R}) \left[\psi\left(\mathbf{r} - \frac{1}{2}\mathbf{R}\right) + \psi\left(\mathbf{r} + \frac{1}{2}\mathbf{R}\right) \right],$$

где

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{e^{-r/\beta}}{(\pi\beta)^{3/2}},$$

β — вариационный параметр и $\pm\mathbf{R}/2$ — координаты ядер.

Рассмотреть также потенциальную кривую $U(R)$ для пробной функции

$$\psi_u(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = C_-(\mathbf{R}) \left[\psi\left(\mathbf{r} - \frac{1}{2}\mathbf{R}\right) - \psi\left(\mathbf{r} + \frac{1}{2}\mathbf{R}\right) \right].$$

ПРИЛОЖЕНИЕ: О ФОРМАЛИЗМЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Основные положения

Дадим краткий перечень основных положений математического формализма квантовой механики:

- а) состоянию физической системы сопоставляется вектор состояния $|\Psi\rangle$ из гильбертова пространства;
- б) физической величине F сопоставляется линейный эрмитов оператор \hat{F} ;
- в) физическая величина F может принимать только собственные значения f оператора \hat{F} ;
- д) математическое ожидание значений величины F в состоянии $|\Psi\rangle$ определяется диагональным матричным элементом $\langle\Psi|\hat{F}|\Psi\rangle$;
- е) закон эволюции вектора состояния определяется оператором Гамильтона системы \hat{H} согласно уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle.$$

Вектора состояний и волновые функции

Вектор состояния $|\Psi_f\rangle \equiv |f\rangle$ сопоставляется системе, состояние которой задано классическими параметрами

$$f = (f_1, f_2, \dots, f_N),$$

которые можно измерять одновременно.

Примеры:

$|\Psi_{\mathbf{p}}\rangle \equiv |\mathbf{p}\rangle$ — вектор состояния частицы с определённым значением импульса \mathbf{p} ;

$|\Psi_{\mathbf{r}}\rangle \equiv |\mathbf{r}\rangle$ — вектор состояния частицы, локализованной в точке \mathbf{r} .

Все возможные векторы состояний образуют линейное пространство, в котором определено скалярное произведение векторов состояний $|\Psi\rangle$ и $|\Phi\rangle$, оно обозначается как $\langle\Psi|\Phi\rangle = \langle\Phi|\Psi\rangle^*$, где $\langle\Psi|$ — вектор из сопряжённого пространства.

В пространстве векторов состояний можно выбрать полный набор независимых ортонормированных векторов $|f\rangle$ таких, что

$$\langle f|f'\rangle = \delta_{ff'}.$$

Этот набор образует базис векторного пространства. Выбор базиса неоднозначен. В квантовой механике выбор базиса называется выбором *представления*.

Волновые функции. Любой вектор состояния $|\Psi\rangle$ задается своими проекциями $\langle f|\Psi\rangle$ на базисные вектора $|f\rangle$:

$$|\Psi\rangle = \sum_f |f\rangle \langle f|\Psi\rangle = \sum_f |f\rangle \psi(f).$$

Проекция $\langle f|\Psi\rangle \equiv \psi(f)$, рассматриваемая при различных f , называется волновой функцией данного состояния в f -представлении.

Если система находится в состоянии $|\Psi_f\rangle$, которое является собственным вектором оператора \hat{F} , т. е.

$$\hat{F} |\Psi_f\rangle = f |\Psi_f\rangle,$$

то при измерении величины F будет получено значение, равное f , с вероятностью единица. Среднее значение F по произволь-

ному состоянию $|\Psi\rangle$ равно

$$\langle\Psi|\hat{F}|\Psi\rangle = \sum_{ff'} \langle\Psi|f\rangle \langle f|\hat{F}|f'\rangle \langle f'|\Psi\rangle = \sum_f f |\psi(f)|^2,$$

т. е. при измерении величины F в состоянии $|\Psi\rangle$ будет получено одно из собственных значений f оператора \hat{F} с вероятностью $|\psi(f)|^2$. Отсюда видно, что $|\psi(f)|^2$ — это вероятность найти значение f . Волновую функцию $\psi(f)$ называют также амплитудой вероятности.

Преобразование волновой функции к другому представлению задаётся формулой¹³

$$\psi(g) = \sum_f \langle g|f\rangle \psi(f),$$

где волновая функция $\langle g|f\rangle = \psi_f(g) = \psi_g^*(f)$ определяет связь двух базисов.

Пример: волновая функция частицы с определённым импульсом в координатном представлении (см. § 1.2)

$$\langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}.$$

Тогда для любой волновой функции с учётом

$$\langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \langle\mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle^*$$

имеем:

$$\psi(\mathbf{p}) = \langle\mathbf{p}|\Psi\rangle = \sum_{\mathbf{r}} \langle\mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle \langle\mathbf{r}|\Psi\rangle = \int \frac{e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi(\mathbf{r}) d^3r;$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle\mathbf{r}|\Psi\rangle = \sum_{\mathbf{p}} \langle\mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle \langle\mathbf{p}|\Psi\rangle = \int \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi(\mathbf{p}) d^3p.$$

¹³Если величина f принимает непрерывный ряд значений, то в этой формуле следует заменить сумму на интеграл $\sum_f \dots \rightarrow \int \dots df$, а в условии ортонормировки $\langle f|f'\rangle = \delta_{ff'}$ символ $\delta_{ff'}$ следует заменить на δ -функцию $\delta(f - f')$.

Операторы. Связь представлений

Если определено преобразование, переводящее вектор состояния $|\Psi\rangle$ в вектор состояния $|\Phi\rangle$, то говорят, что задан оператор \hat{G} :

$$|\Phi\rangle = \hat{G} |\Psi\rangle.$$

Матрица оператора. Действие оператора \hat{G} на базисный вектор состояния $|f\rangle$ задаётся матрицей $G_{f'f} = \langle f' | \hat{G} | f \rangle$:

$$\hat{G}|f\rangle = \sum_{f'} |f'\rangle \langle f' | \hat{G} | f \rangle = \sum_{f'} |f'\rangle G_{f'f}.$$

Для произвольного вектора состояния

$$\begin{aligned} \hat{G}|\Psi\rangle &= \sum_f |f\rangle \langle f | \hat{G} |\Psi\rangle = \sum_{ff'} |f\rangle \langle f | \hat{G} | f'\rangle \langle f' | \Psi\rangle = \\ &= \sum_{ff'} |f\rangle G_{ff'} \psi(f'). \end{aligned}$$

Таким образом, оператор

$$\hat{G} = \sum_{ff'} |f\rangle G_{ff'} \langle f'|$$

полностью определён, если известна его матрица $G_{ff'}$. Действие оператора на волновую функцию получим, проецируя соотношение $|\Phi\rangle = \hat{G}|\Psi\rangle$ на f -базис:

$$\varphi(f) = \langle f | \Phi \rangle = \sum_{f'} G_{ff'} \psi(f'); \quad \psi(f') = \langle f' | \Psi \rangle.$$

Связь операторов в различных представлениях:

$$\begin{aligned} G_{ff'} &= \langle f | \hat{G} | f' \rangle = \sum_{gg'} \langle f | g \rangle \langle g | \hat{G} | g' \rangle \langle g' | f' \rangle = \\ &= \sum_{gg'} \langle f | g \rangle G_{gg'} \langle g' | f' \rangle. \end{aligned}$$

Пример: матрица оператора импульса в \mathbf{p} -представлении имеет вид

$$\langle \mathbf{p}' | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{p} \rangle = \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \mathbf{p};$$

в координатном представлении —

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}' | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r} \rangle &= \int \psi_{\mathbf{r}'}^*(\mathbf{p}') \mathbf{p} \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}) \psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{p}) d^3p d^3p' = \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial(\mathbf{r}' - \mathbf{r})} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}). \end{aligned}$$

Его действие на волновую функцию $\psi(\mathbf{r})$ сводится к дифференцированию

$$\int \langle \mathbf{r}' | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{r}' \rangle \psi(\mathbf{r}') d^3r' = -i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}}.$$

Аналогично

$$\langle \mathbf{r}' | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{r} \rangle = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) \mathbf{r}; \quad \langle \mathbf{p}' | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{p} \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial(\mathbf{p}' - \mathbf{p})} \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}).$$

$$\int \langle \mathbf{p}' | \hat{\mathbf{r}} | \mathbf{p}' \rangle \psi(\mathbf{p}') d^3p' = i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{p})}{\partial \mathbf{p}}.$$

На этих примерах видно, что матрицы операторов $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{p}}$ (и построенные из них) пропорциональны δ -функции или ее производной:

$$G_{ff'} = \hat{G}_S(f) \delta(f' - f).$$

Их действие на волновую функцию сводится к действию на волновую функцию оператора $\hat{G}_S(f)$:

$$\sum_{f'} G_{ff'} \psi(f') = \hat{G}_S(f) \psi(f).$$

Оператор $\hat{G}_S(f)$ обычно называют *шрёдингеровским оператором* в f -представлении (в отличие от матричного $G_{ff'}$). В частности, в \mathbf{r} -представлении

$$\hat{\mathbf{r}}_S = \mathbf{r}, \quad \hat{\mathbf{p}}_S = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}};$$

в \mathbf{p} -представлении

$$\hat{\mathbf{r}}_S = +i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}, \quad \hat{\mathbf{p}}_S = \mathbf{p}.$$

Библиографический список

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1989.
2. Галицкий В. М., Карнаков Б. М., В.И.Коган В. И. Задачи по квантовой механике. М.: Наука, 1992.
3. Гольдман И. И., Кривченков В. Д. Сборник задач по квантовой механике. М.: ГИТТЛ, 1957.
4. Зелевинский В. Г. Лекции по квантовой механике. Новосибирск: Сибирское университетское издательство, 2002.
5. Альтишкуль Л. М., Зелевинский В. Г., Коткин Г. Л., Сербо В. Г., Хейфец С. А., Хрипович И. Б., Черняк В. Л. Сборник задач по квантовой механике. Новосибирск: Ротапринтное издание НГУ, 1974.

Учебное издание

Сербо Валерий Георгиевич,
Хриплович Иосиф Бенционович

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Учебное пособие

Второе издание, исправленное

Корректор *Е. П. Войтенко*

Подписано в печать 22.01.2010 г.

Формат 60x84 1/16. Уч.-изд. л. 17,1. Усл. печ. л. 19,9.

Тираж 200 экз. Заказ №

Редакционно-издательский центр НГУ
630090, Новосибирск-90, ул. Пирогова, 2.