

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Физический факультет
Кафедра теоретической физики

И. Ф. Гинзбург

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ
(нерелятивистская теория)

Учебное пособие

Новосибирск
2010

ББК
УДК

Гинзбург И. Ф. Основы квантовой механики (нерелятивистская теория): Учебное пособие/ Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2010. 283 с.

ISBN

Пособие составлено на основе многолетнего опыта преподавания автором основного курса квантовой механики и чтения спецкурса "Дополнительные главы квантовой механики". В основе построения курса - возможно более полное использование знаний, имеющихся у студентов-физиков и полученных в предшествующих курсах математики и физики в НГУ. Поэтому в начале курса нет традиционного описания экспериментального материала, послужившего мотивом к изобретению квантовой механики, с самого начала активно используется знакомый по курсу функционального анализа дираковский подход (векторы состояния и т.п.). Наряду с этим включены некоторые разделы, не входящие в обычные курсы по недостатку времени (когерентные состояния, эффект Мессбаура, эффект Казимира, квантование колебаний решетки и др.).

Предназначено для студентов третьего курса, изучающих квантовую механику, и студентов физических специальностей других университетов.

Рецензент

проф., д-р физ.-мат. наук В. Г. Сербо

Учебное пособие подготовлено в рамках реализации Программы развития НИУ-НГУ на 2009–2018 г. г.

ISBN

© Новосибирский государственный университет, 2010
© И. Ф. Гинзбург, 2010

Оглавление

Предисловие	9
Повторяющиеся обозначения	12
Некоторые константы	13
Глава 1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ	14
§ 1.1. Введение	14
1.1.1. Аналогия с электродинамикой	15
§ 1.2. Основные положения квантовой механики	16
§ 1.3. Операторы физических величин I	19
§ 1.4. Векторы состояний и волновые функции	21
§ 1.5. Операторы II	24
§ 1.6. Одновременная измеримость и полный набор наблюдаемых	27
§ 1.7. Оператор конечного сдвига, оператор импульса	28
§ 1.8. Соотношение неопределенностей	29
§ 1.9. Измерения в квантовой механике	32
§ 1.10. Матрица плотности	34
§ 1.11. Задачи	35
Глава 2. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА	37
§ 2.1. Основные факты	37
2.1.1. Уравнение Шредингера	37
2.1.2. Эволюция состояния со временем	39
2.1.3. Плотность тока вероятности	39
2.1.4. Теорема о вириале	40
§ 2.2. Сохраняющиеся величины. Симметрия и вырождение стационарных состояний	41
§ 2.3. Симметрия по отношению к отражениям и обращению времени	43
§ 2.4. Одномерные задачи	44
2.4.1. Дискретный спектр	46
2.4.2. Прямоугольная потенциальная яма	47
2.4.3. Мелкая яма, δ -яма	49
2.4.4. Непрерывный спектр	50
2.4.5. Нестабильные частицы. Квазистационарные состояния	52
§ 2.5. Некоторые правила сумм	53

§ 2.6.	Задачи	55
Глава 3.	ЗАВИСИМОСТЬ ОПЕРАТОРОВ ОТ ВРЕМЕНИ	58
§ 3.1.	Оператор эволюции системы во времени	58
§ 3.2.	Гайзенберговская картина	59
§ 3.3.	Производная оператора по времени	59
§ 3.4.	Сложные системы. Представление взаимодействия	61
§ 3.5.	Задачи	61
Глава 4.	ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР	63
§ 4.1.	Одномерный осциллятор. Операторный метод	63
4.1.1.	Явная форма оператора отражения координат любой системы	67
4.1.2.	Переход к координатному представлению	67
4.1.3.	Двумерный симметричный осциллятор	68
4.1.4.	Применение к неосцилляторным системам	69
§ 4.2.	Решение с помощью разложения в ряд	69
§ 4.3.	«Нулевые колебания» осциллятора и их наблюдение	70
§ 4.4.	Когерентные состояния	73
§ 4.5.	Задачи	77
Глава 5.	ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ	79
§ 5.1.	Вариационный метод	79
§ 5.2.	Теория возмущений	80
5.2.1.	Невырожденный случай	81
5.2.2.	Производная от энергии по параметру	82
5.2.3.	Теория возмущений при наличии вырождения	83
5.2.4.	Системы с близко расположенными уровнями	85
§ 5.3.	Квазиклассический случай	86
5.3.1.	Волновая функция. Условие применимости приближения	87
5.3.2.	Правила квантования Бора–Зоммерфельда. I.	89
5.3.3.	Условия сшивки	92
5.3.4.	Метод комплексной плоскости для получения правил сшивки	94
5.3.5.	Правила квантования Бора–Зоммерфельда. II.	97
5.3.6.	Прохождение сквозь барьер	98
5.3.7.	Время жизни квазистационарного состояния	100
5.3.8.	Двойная яма	102
5.3.9.	Надбарьерное отражение	105
§ 5.4.	Задачи	106
Глава 6.	МОМЕНТ ИМПУЛЬСА	109
§ 6.1.	Следствия алгебры коммутаторов	110
6.1.1.	Состояния с заданным моментом, $\ell = 1$	112

§ 6.2.	Следствия координатной записи	113
§ 6.3.	Вращение координат	116
§ 6.4.	Задачи	116
Глава 7.	ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОЕ ПОЛЕ	118
§ 7.1.	Задача двух тел. Общие свойства	118
§ 7.2.	Поле, быстро убывающее с расстоянием	121
§ 7.3.	Кулоновская задача. Атом водорода	123
	7.3.1. Атом в электрическом поле	129
	7.3.2. Силы Ван-дер-Ваальса	130
§ 7.4.	Повышенная симметрия некоторых трехмерных систем	131
	7.4.1. Изотропный осциллятор	131
	7.4.2. Кулоновская задача. Метод Фока	132
§ 7.5.	Задачи	134
Глава 8.	ПЕРИОДИЧЕСКОЕ ПОЛЕ	137
§ 8.1.	Основные понятия	137
§ 8.2.	Движение в периодическом поле	138
	8.2.1. Общее рассмотрение	138
	8.2.2. Периодическое поле из δ -ям или барьеров	141
	8.2.3. Слабое периодическое поле	145
	8.2.4. Качественная картина	146
§ 8.3.	Малые колебания линейных цепочек	148
	8.3.1. Цепочка одноатомных молекул	148
	8.3.2. Цепочка двухатомных молекул	151
§ 8.4.	Следствия нарушения периодичности	154
§ 8.5.	Квазичастицы	157
§ 8.6.	Некоторые черты трехмерной решетки	157
§ 8.7.	Эффект Мессбауэра	160
§ 8.8.	Задачи	162
Глава 9.	СПИН	163
§ 9.1.	Основные факты	163
§ 9.2.	Частицы со спином $1/2$. Спиноры	164
	9.2.1. Преобразование спиноров при вращении координат	165
§ 9.3.	Разложение по базису матриц Паули как технический прием	166
§ 9.4.	Задачи	167
Глава 10.	ДВИЖЕНИЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ	168
§ 10.1.	Магнитный момент частицы	168
§ 10.2.	Уравнение Шредингера	169
	10.2.1. Переход к магнитному моменту	170
	10.2.2. Электрон в однородном магнитном поле	171
§ 10.3.	Движение спина в магнитном поле	174
§ 10.4.	Калибровочная инвариантность	175

§ 10.5. Задачи	176
Глава 11. СЛОЖЕНИЕ МОМЕНТОВ	178
§ 11.1. Сложение моментов	178
§ 11.2. Матричные элементы скаляров и векторов	182
11.2.1. Правила отбора	182
11.2.2. Усреднение векторного оператора	184
§ 11.3. Задачи	185
Глава 12. ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ	186
§ 12.1. Волновая функция системы тождественных частиц	186
12.1.1. Обменное взаимодействие	188
§ 12.2. Понятие о вторичном квантовании	189
§ 12.3. Квантование электромагнитного поля	192
12.3.1. Неквантованное электромагнитное поле	192
12.3.2. Электромагнитное поле в кубе. Осцилляторы поля	194
12.3.3. Квантование поля	194
§ 12.4. Системы с взаимодействием	197
12.4.1. О взаимодействии электронов с решеткой	198
§ 12.5. Задачи	198
Глава 13. АТОМЫ И МОЛЕКУЛЫ	200
§ 13.1. Атомы	201
13.1.1. Адиабатическое приближение. Электронные конфигурации	201
13.1.2. Корреляционные силы	203
13.1.3. Спин-орбитальное взаимодействие. Тонкая структура	204
13.1.4. Тонкая структура уровней атома водорода	205
13.1.5. Малые поправки	207
13.1.6. Периодическая система элементов	208
13.1.7. Атом в магнитном поле	210
§ 13.2. Молекулы	213
13.2.1. Типы связей	213
13.2.2. Колебательные и вращательные уровни	214
§ 13.3. Задачи	217
Глава 14. СИСТЕМЫ С ГАМИЛЬТониАНОМ, ЗАВИСЯЩИМ ОТ ВРЕМЕНИ	218
§ 14.1. Постановка вопроса	218
§ 14.2. Общий подход	219
§ 14.3. Теория возмущений	220
14.3.1. Пример. Возбуждение атома водорода пролетающим ионом	222
§ 14.4. Скачкообразное изменение гамильтониана	225
§ 14.5. Периодическое возмущение	226

14.5.1. Нерезонансное возмущение	226
14.5.2. Почти резонансное возмущение	227
§ 14.6. Переходы в непрерывный спектр	228
14.6.1. Плотность числа состояний	228
14.6.2. Переходы в непрерывный спектр под действием слабого периодического внешнего поля	229
§ 14.7. Фотоэффект	231
§ 14.8. Задачи	233
Глава 15. РАССЕЯНИЕ	234
§ 15.1. Постановка задачи. Общие соотношения	234
15.1.1. Амплитуда рассеяния. Сечение рассеяния	234
15.1.2. Оптическая теорема	237
15.1.3. Особенности рассеяния частиц со спином	238
15.1.4. Конечность полного сечения	238
§ 15.2. Уравнение Шредингера в интегральной форме	239
§ 15.3. Борновское приближение	240
15.3.1. Рассеяние на потенциале Юкавы	241
15.3.2. Формула Резерфорда	242
15.3.3. Атомный формфактор	242
15.3.4. Критерий применимости приближения	245
15.3.5. Возможное видоизменение	246
§ 15.4. Разложение по парциальным волнам	246
15.4.1. Парциальные амплитуды	246
15.4.2. Парциальные амплитуды и фазы рассеяния	248
§ 15.5. Рассеяние при наличии неупругости	249
15.5.1. Упругое рассеяние медленных частиц	250
15.5.2. Рассеяние быстрых частиц на сером шаре	250
15.5.3. Резонансное рассеяние	252
15.5.4. Особенности рассеяния заряженных частиц	253
§ 15.6. Столкновения тождественных частиц	254
§ 15.7. Ограничения подхода	254
§ 15.8. Некоторые черты процессов при очень больших энергиях	255
§ 15.9. Задачи	256
Глава 16. ИСПУСКАНИЕ И ПОГЛОЩЕНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ	258
§ 16.1. Излучение и поглощение света	258
16.1.1. Коэффициенты Эйнштейна	259
16.1.2. Вероятность излучения. Подход Ферми	259
16.1.3. Излучение света. Квантованные поля	261
§ 16.2. Излучение высших мультиполей	263
§ 16.3. Правила отбора для излучения	265
§ 16.4. Ширина спектральной линии	266
16.4.1. Собственная ширина уровня	266
16.4.2. Ширина наблюдаемой спектральной линии	268

16.4.3. Об интерференции волн. Когерентность	268
§ 16.5. Принципы работы лазеров	269
§ 16.6. Задачи	270
Глава 17. ПОЛЕЗНЫЕ ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ СВЕДЕНИЯ	271
§ 17.1. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА НА КОМПЬЮТЕРЕ	271
17.1.1. Постановка задачи	271
17.1.2. Конечный набор ям	273
17.1.3. Периодическое поле	275
17.1.4. Движение в центральном поле	276
§ 17.2. Математические дополнения	277
17.2.1. Некоторые тензоры	277
17.2.2. δ -функция, θ -функция	277
17.2.3. γ -функция. Некоторые интегралы и ряды	280
17.2.4. Частные значения и свойства некоторых специаль- ных функций	280
17.2.5. Некоторые операторные соотношения	281
17.2.6. Момент импульса в четырехмерном евклидовом пространстве	282
17.2.7. Некоторые средние для атома водорода	282
Литература	284

ПРЕДИСЛОВИЕ

Предлагаемое пособие составлено на основе многолетнего опыта преподавания автором основного курса квантовой механики, а также чтения спецкурса "Дополнительные главы квантовой механики". Оно отличается от известных мне книг отбором материала и манерой изложения отдельных тем¹. В основе построения курса - возможно более полное использование знаний, имеющихся у студентов-физиков и полученных в предшествующих курсах математики и физики в НГУ. Поэтому в начале курса нет традиционного описания экспериментального материала, послужившего мотивом к изобретению квантовой механики, с самого начала активно используется знакомый по курсу функционального анализа дираковский подход (векторы состояния и т.п.). Наряду с этим включены некоторые разделы, не входящие в обычные курсы по недостатку времени (когерентные состояния, эффект Мессбауэра, эффект Казимира, квантование колебаний решетки, использование метода комплексной плоскости при описании квазиклассических явлений и др.). Важную роль играют оценки области применимости получаемых результатов.

Одним из элементов различия является отношение к вычислительной части. В прежние годы важной частью более или менее фундаментального курса было коллекционирование случаев, в которых уравнение Шредингера решается точно. Каждая из таких точно решаемых задач представляла собой отдельную жемчужину теории дифференциальных уравнений, обычно почти не дававшую опыта для решения новых практически важных задач. На мой взгляд, коллекция точно решаемых задач ныне важна лишь для отдельных ценителей. Поэтому я строю точные решения лишь для задач небольшого списка — *прямоугольная яма, осциллятор, собственные функции оператора момента импульса, кулоновская задача*, и привычные аналитические методы там, где это возможно, заменены на операторные.

По той же причине я постарался как можно раньше рассмотреть пакет приближенных методов квантовой механики, чтобы использовать их при обсуждении конкретных физических систем (*решение многих задач — не иллюстрация при-*

¹ Существует множество учебников квантовой механики, я отмечу учебники [1-9], каждый из которых демонстрирует свой подход к курсу и решает множество интересных задач. Громадная литература посвящена применению квантовой механики к самым разным физическим задачам. Среди этих работ я хотел бы выделить две книги, посвященные качественным методам квантовой механики в их применении к самым разным вопросам физики [15, 16]. Их изучение доставит удовольствие читателю. Совершенно другой подход к построению теории содержится в книге Р. Фейнмана и А. Хибса [14], которая заслуживает специального чтения студентами, ориентирующимися на изучение фундаментальной теории.

ближних методов, а использование приближенных методов для описания рассматриваемого круга явлений).

Традиционно курс квантовой механики является также введением в курсы атомной физики и физики твердого тела. Поэтому часть главы 8 составляют разделы, обычно включаемые в курс *физика твердого тела*. Их главная роль состоит в том, чтобы, встретившись с соответствующими понятиями в специальной литературе, читатель мог бы без особого труда понять, о чем идет речь, и если потребуется, сравнительно легко изучить соответствующую специальную литературу.

Хотя основное содержание книги относится к нерелятивистской теории, я нашел полезным при описании атомных систем активно использовать постоянную тонкой структуры α . Это делает понимание основных явлений более ясным. Я отказался от описания атомной модели Томаса-Ферми, считая, что ее место — в курсе статистической физики.

В этой связи следует обратить внимание на существенное отличие квантовых релятивистских задач от нерелятивистских. В нерелятивистской теории, которую мы изучаем в этом курсе, универсальное уравнение Шредингера применимо для описания любой системы, надо лишь найти соответствующий потенциал. В релятивистской теории такого универсального уравнения нет (уравнения для частиц со спином 0 и $1/2$ принципиальным образом различаются). Более того, в большинстве релятивистских задач представление о задаваемом инструментально потенциале является плохим приближением, взаимопревращения частиц становятся важным предметом изучения; на место квантовой механики и электродинамики становится *квантовая теория поля* и ее частные случаи *квантовая электродинамика*, *квантовая хромодинамика* (теория ядерных сил), *электрослабая теория (объединенная теория электромагнитных и слабых взаимодействий)*, ... Поэтому возможность создания полноценного курса релятивистской квантовой механики представляется мне сомнительной. В то же время без описаний явлений излучения в нерелятивистской области движения частиц введение в атомную физику было бы неполным. Это обусловило выделению соответствующих задач в отдельную главу 16.

При наличии прекрасных задачник по квантовой механике [10], [11] я счел необходимым включить задачи в состав пособия. Задачи составляют существенную часть курса. Ссылки на задачи данной главы даются просто по номерам соответствующего раздела, при ссылках на задачи других глав впереди добавляется номер этой главы, так, задача 1.9 — это задача 9 к гл. 1.

В НГУ создан замечательный пакет программ QUANT для упражнений по квантовой механике, с чрезвычайно дружелюбным интерфейсом. Пользователь работает только с задачами квантовой механики. При работе с этим пакетом он знакомится с таким многообразием ситуаций и физических задач, возникающих при варьировании параметров, которое практически невозможно разобрать другими способами из-за недостатка времени. Принципы построения этих программ и примерный перечень типичных заданий содержатся в приложении В.1. В настоящее время (конец 2010г.) этот пакет перерабатывается с учетом новых возможностей компьютерного обеспечения, но основные идеи остаются неизменными.

Я счел полезным собрать в § В.2 некоторые математические факты, либо не очень хорошо известные студентам, либо часто забываемые — в таких формулировках,

которые необходимы физике.

Ссылки на литературу обозначаются номером в квадратных скобках, например, [2]. Я использовал значки ■, ●, □, ◆ и т. п. для обозначения структурирования текста и иерархии важности структур. Читатель поймет эту иерархию без детальных пояснений.

Закончу изложением своей точки зрения на причины необходимости изучения серьезного курса квантовой механики всеми студентами-физиками, и теоретиками, и экспериментаторами, и специалистами по вычислительным методам.

- Квантовая механика доставляет новые подходы и идеи, потенциально полезные в новых областях (новая концепция вероятности, новое понимание тождественности). Принцип дополнительности, разработанный при построении основ квантовой механики, полезен для понимания многих естественно-научных задач в целом. Реализуемая ныне идея квантового кодирования, принципиально недоступного для посторонних, основана на постулатах квантовой механики. На тех же постулатах основана разрабатываемая концепция квантового компьютера. Я надеюсь, что может принести пользу применение идей вторичного квантования для описания систем из большого количества одинаковых элементов (как память компьютера).

- Наши выпускники в частности должны быть высококультурными потребителями сложного оборудования, им следует чувствовать, когда производители этого оборудования пытаются их обмануть. В этой связи я обычно привожу такой пример. Некоторое время назад я читал лекции в Новосибирском институте связи (ныне *СибГУТИ*). Увидев однажды у студентов учебник по электронным приборам, я попросил у них книгу, открыл ее на разделе «Туннельный диод» и прочел: *туннельный диод работает со скоростью света*. Если наш выпускник освоил основные идеи курса, он должен немедленно понять, что подобное утверждение — обман (нередко — следствие малограмотности автора, а не сознательное жульничество).

Невзирая на многократное редактирование, как и все известные мне учебники или научные книги, этот текст вряд ли свободен от опечаток, ненужных повторений, неточностей и неясных мест (надеюсь, что их осталось мало). Я заранее благодарен читателям, которые укажут на эти погрешности, что может быть исправлено в возможном втором издании книги. Я с интересом восприму также предложения по добавлению новых тем и (или) исключению некоторых разделов. Предложения просьба отправлять по адресу ginzburg@math.nsc.ru.

Новосибирск, 2010 г.

Повторяющиеся обозначения

$\nabla = (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$;

$v.p.$ — главное значение;

$r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$.

$k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ — волновое число для свободной частицы с энергией E .

Стандартная номенклатура термов:

$L \equiv \hbar\ell$ — значение момента импульса (орбитального момента), значения орбитального момента ℓ обозначают буквами

$$\begin{array}{cccccccc} \ell = & 0, & 1, & 2, & 3, & 4, & 5, & \dots \\ & s, & p, & d, & f, & g, & h, & \dots \end{array} \quad (1)$$

Эти обозначения сложились из названий спектральных линий атома водорода — sharp, principal, diffusive, fundamental, а дальше просто по алфавиту;

ℓ — орбитальное квантовое число;

$L_z \equiv \hbar m$ — проекция момента импульса на ось z ,

m — магнитное (азимутальное) квантовое число;

n_r — число нулей радиальной волновой функции (радиальное квантовое число);

$n = n_r + \ell + 1$ — главное квантовое число.

Атомная система единиц:

единица длины (боровский радиус) $a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} \equiv \frac{\hbar}{mc\alpha} = 0,53 \cdot 10^{-8}$ см;

единица времени $\tau_B = \frac{\hbar^3}{me^4} \equiv \frac{\hbar}{mc^2\alpha^2} = 2,4 \cdot 10^{-17}$ с;

единица скорости $v_B = \alpha c$;

единица энергии $R_y = \frac{me^4}{2\hbar^2} \equiv \frac{mc^2\alpha^2}{2} = 13,6$ эВ (Ридберг).

Некоторые константы и типичные значения отдельных величин

$\hbar = 1,05 \cdot 10^{-34}$ Дж с — постоянная Планка.

$e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл — заряд электрона.

$c = 2,9979 \cdot 10^8$ м/с — скорость света.

1 эВ — 1 электронвольт = $1,6 \cdot 10^{-19}$ Дж, 1 МэВ = 10^6 эВ.

1 Å (1 ангстрем) = 10^{-8} см.

1 Фм (1 Ферми) = 1 фемтометр = 10^{-13} см.

$m \equiv m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ кг — масса электрона.

$m_e c^2 = 0,511$ МэВ — энергия покоя электрона.

$m_p = 1,66 \cdot 10^{-27}$ кг — масса протона.

$m_p c^2 = 938,27$ МэВ — энергия покоя протона.

$m_n c^2 = 939,565$ МэВ — энергия покоя нейтрона.

$\alpha = e^2/(\hbar c) = 1/137$ — постоянная тонкой структуры.

$\mu_B = e\hbar/2m_e c = 5,8 \cdot 10^{-11}$ МэВ/Т — магнетон Бора.

(здесь Т = Тесла — единица измерения магнитного поля).

$N_{Av} = 6,02 \cdot 10^{23}$ — число Авогадро.

Удобно использовать энергетическую шкалу температуры. Переход к градусам дает замена $T \Rightarrow kT^\circ$ (К); 1 эВ = 11604 К.

Комнатная температура в оценках $T = 300$ К $\approx 0,025$ эВ.

Типичные значения плотности числа частиц n :

$n \approx 3 \cdot 10^{19}$ см⁻³ — воздух при нормальных условиях;

$n \approx 6 \cdot 10^{22}$ см⁻³ — металл Al.

Глава 1

ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

§ 1.1. Введение

Хорошо известно, что переход к существенно новым масштабам рассматриваемых явлений может приводить к необходимости нового их описания (включающего классическое описание как предельный случай на «нормальных» масштабах). В частности, известно, что

состояние системы микроскопических частиц описывается волновой функцией $\psi(x, t)$.

Поначалу для нас важно только, что ψ есть некоторая, скорее всего, гладкая функция координат и времени.

Характерные масштабы квантовых явлений определяются, как и для фотонов, известными соотношениями $E = \hbar\omega$, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ с постоянной Планка — *квантом действия*

$$\hbar = 1,0546 \cdot 10^{-27} \text{ эрг} \cdot \text{с} = 1,0546 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}.$$

Отличие квантового поведения от классического становится существенным когда величины имеющие ту же размерность, что и величина \hbar (например, момент импульса, произведение изменения энергии на время взаимодействия, изменение действия в процессе) не слишком велики по сравнению с \hbar . Если же такие величины много превосходят \hbar , квантовые предсказания не должны отличаться от классических (*принцип соответствия*). Мы увидим далее, что $|\psi(x, t)|^2$ имеет смысл плотности вероятности найти частицу в точке x .

Справедливость квантовой механики подтверждается уверенным функционированием множества устройств, действие которых основано на ее законах (устройства твердотельной электроники, лазеры, детекторы элементарных частиц и т. п.). Поэтому я не нахожу нужным начинать курс (как это делают многие авторы) с обсуждения первых экспериментов, послуживших аргументом в пользу новой в свое время теории (дифракция электронов, нейтронов и других частиц, дискретные спектры энергии и т. п.).

Наш курс направлен на решение следующих задач.

- Выяснить, что значит описание на основе упомянутых утверждений; понять, что оно вносит нового в понимание явлений микромира по сравнению с привычным нам макромиром, каковы здесь новые постановки проблем.
- Разобраться в особенностях описания разных физических систем; описать некоторые физически интересные системы.
- Овладеть приближенными методами, которые позволят отыскивать ответы в большинстве физически интересных проблем.
- Демонстрируемые новые подходы к постановке и решению задач квантовой механики и физики твердого тела должны войти в интеллектуальный багаж слушателей, используемый ими для решения возникающих перед ними задач не только в этих сравнительно узких областях, но и вне их — вплоть до проблем организации производства и т. п.

Простейшие объекты.

Плоская волна

$$\psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} \equiv A e^{i(px - Et)/\hbar}. \quad (1.1)$$

Волновой пакет, близкий к монохроматической волне, — суперпозиция плоских волн с амплитудой $A(k)$, которая представляет собой функцию с максимумом в точке k_0 и быстро убывающую при удалении от максимума («купол»). Выполнив простые разложения, получим

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int A(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega(\mathbf{k})t)} d^3k \approx A(\mathbf{k}_0) f(\mathbf{r}, t) e^{i(\mathbf{k}_0\mathbf{r} - \omega_0 t)}. \quad (1.2)$$

В одномерном случае обозначим через Δk ширину этого «купола» и будем считать $\Delta k \ll |k_0|$. Тогда

$$f(x, t) = \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i(qx - \omega t)} dq \approx 2\Delta k \frac{\sin[(x - u_g t)\Delta k]}{(x - u_g t)\Delta k}.$$

Здесь $u_g = \partial\omega/\partial k = \partial E/\partial p$ — групповая скорость пакета.

Входящие в пакет разные гармоники имеют разные скорости ω/k . При движении некоторые компоненты бегут быстрее центра тяжести, а другие отстают. Поэтому со временем размер пакета увеличивается, происходит *расплывание пакета*.

1.1.1. Аналогия с электродинамикой

Чтобы уяснить идеи квантовомеханического описания, перепишем некоторые факты из теории электромагнитного поля ($\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$), немного видоизменив язык описания. Рассмотрим столбец F с шестью компонентами

$$F_\alpha = (E_1, E_2, E_3, B_1, B_2, B_3)$$

и строку F^\dagger с теми же компонентами, претерпевшими комплексное сопряжение, — аналоги $\psi(\mathbf{x}, t)$ и $\psi^*(\mathbf{x}, t)$. (Если используется действительное представление для полей, то строка получается из столбца простым транспонированием.) Тогда энергия

поля есть

$$\begin{aligned}
 W &= \frac{1}{8\pi} \int d^3x (\mathbf{DE} + \mathbf{BH}) \rightarrow \\
 &\rightarrow \frac{1}{8\pi} \sum_{i,j} \int d^3x (E_i \varepsilon_{ij} E_j + B_i (\mu^{-1})_{ij} B_j) \Rightarrow \\
 &\Rightarrow \frac{1}{16\pi} \int d^3x (E_i^* \varepsilon_{ij} E_j + B_i^* (\mu^{-1})_{ij} B_j) \equiv \\
 &\equiv \sum_{\alpha,\beta} \int d^3x (F_\alpha^\dagger \mathcal{W}_{\alpha\beta} F_\beta), \\
 \text{где } W &= \frac{1}{16\pi} \left\{ \begin{array}{cc} \varepsilon_{ij} & 0 \\ 0 & (\mu^{-1})_{ij} \end{array} \right\}.
 \end{aligned} \tag{1.3a}$$

Точно так же импульс поля есть

$$\begin{aligned}
 \mathbf{P} &= \frac{1}{4\pi c} \int d^3x [\mathbf{E} \times \mathbf{B}]; \quad P_i = \frac{1}{4\pi c} \int d^3x E_j e_{ijk} B_k \Rightarrow \\
 &\Rightarrow \frac{1}{8\pi c} \int d^3x E_j^* e_{ijk} B_k \equiv \sum_{\alpha,\beta} \int d^3x (F_\alpha^\dagger \mathcal{P}_{i\alpha\beta} F_\beta), \\
 \text{где } P_i &= \frac{1}{8\pi c} \left\{ \begin{array}{cc} 0 & e_{i,j,k-3} \\ e_{i,j-3,k} & 0 \end{array} \right\}.
 \end{aligned} \tag{1.3б}$$

(В этих выражениях элементами матриц \mathcal{W} и \mathcal{P} являются матрицы $3 \otimes 3$, $e_{ijk} \equiv e_{ijk}^i$, ε_{ij} , $(\mu^{-1})_{ij}$ и 0.)

Итак, в электродинамике без зарядов и токов наблюдаемые значения физических величин определяются билинейными формами от поля F с помощью некоторых действий — операторов. Каждой физической величине A соответствует своя матрица \hat{A} , т. е. свой способ построения этой билинейной формы — свое правило обращения с полем, так что среднее значение величины A в состоянии с полем F есть (индексы опущены)

$$\langle A(t) \rangle = \int d^3x F^\dagger \hat{A} F.$$

Можно также говорить, что физические величины описываются свертками вектора F^\dagger с векторами $\hat{A}F$, которые получаются из F действием **операторов** \hat{A} — в наших примерах — матриц $6 \otimes 6$.

■ Нерелятивистская квантовая механика применяется главным образом для описания явлений в атомах, молекулах, кристаллах, ядрах. Каждый отдельный электрон (или протон) оказывается в поле действия множества других частиц (плюс, может быть, внешнее поле), и суммарное поле может иметь весьма разнообразную форму. Поэтому в квантовой механике изучают движения частиц в самых разных полях.

§ 1.2. Основные положения квантовой механики

Естественное обобщение этой картины для квантовой теории выглядит следующим образом. Наблюдаемые значения физических величин определяются билинейными формами от волновой функции. Каждой физической величине A соответствует

свой способ построения этой билинейной формы — свой оператор \hat{A} , так что среднее значение величины A в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi(x)$ есть

$$\langle A(t) \rangle = \int d^3x \psi^*(x) \hat{A}(t) \psi(x). \quad (1.4)$$

В электродинамике поля действительны, комплексная форма записи поля — технический прием (формальная причина действительности поля — в том, что оно измеримо, например, с помощью пробного заряда e). Напротив, в квантовой механике волновая функция непосредственно не измерима. Поэтому она не обязательно действительна.

◆ **Новые черты квантовой механики.** Важнейшей новой идеей квантовой механики (*Гайзенберг*) является использование в ее вычислениях, помимо привычных *наблюдаемых величин*, еще и вспомогательных, *принципиально ненаблюдаемых величин*. Теория должна однозначно описывать *наблюдаемые величины* (такие, как энергии излученных частиц, потоки рассеянных частиц и т. п.), но не обязана однозначно отвечать на **приятные задающему** вопросы о *ненаблюдаемых величинах*, и в частности, о *промежуточном состоянии*. Построение последовательной теории без использования ненаблюдаемых величин невозможно.

Описания ненаблюдаемых величин в разных подходах могут различаться. Так, волновая функция определена с точностью до несущественного фазового множителя, и в задаче о собственных функциях нередко *можно выбрать* чисто действительное решение. Хорошую (хотя и неполную) аналогию представляет потенциал электрического поля. Измеримая величина — разность потенциалов, поэтому потенциал определен неоднозначно — с точностью до константы, обычно *мы договариваемся* принимать за ноль значение потенциала на бесконечности.

Оказалось, что некоторые вопросы, которые кажутся естественными с классической точки зрения, лишены точного смысла в квантовой теории. Хорошо известный пример — это вопрос, *какова скорость частицы в тот момент, когда она находится в заданной точке?* Этот вопрос схож с вопросом: *какова была скорость толпы, когда Вы были в какой-то точке внутри нее?* Оба эти вопроса не имеют однозначных ответов, но на каждый из них можно получить приближенный ответ. Отличие ситуации в квантовой механике от ситуации с толпой состоит в том, что во втором случае можно сколь угодно хорошо организовать толпу и получить ответ с любой желаемой точностью. В квантовой теории неточность ответа является фундаментальным свойством. Погрешности измерения координаты и импульса невозможно одновременно сделать сколь угодно малыми, они связаны подробно обсуждаемым ниже *соотношением неопределенностей* (изучавшимся в курсе электродинамики). Эти соотношения определяют *квантовый предел погрешности измерения*, который невозможно превзойти с помощью усовершенствования приборов.

◆ **О корпускулярно-волновом дуализме и т. п.** От изучающих квантовую механику и от обывателей (в частности, многих философов) нередко приходится слышать вопрос — *так электрон — это волна или частица?*, *как можно представить себе корпускулярно-волновой дуализм?* Ответ состоит в том, что вопросы плохо поставлены.

На малых расстояниях законы Природы имеют дело с новыми реальностями, которые не допускают классического описания. Мы же («потребители») описываем явления на привычном нам классическом языке, в котором, в частности, понятия волны и частицы представляются принципиально различными. (Это различие вызвало в XVII-XIX веках жаркие споры о природе света — волны это или частицы. В современном описании это противопоставление исчезло.) При описании некоторых явлений яснее проявляется волновая природа электрона, при описании других — корпускулярная, а иногда удобен синтез обоих описаний.

■ Перечислим теперь основные положения квантовой механики, справедливые для *изолированной системы*.

1. Состояние описывается с помощью волновой функции, которая не является наблюдаемой величиной. Для изолированной системы это полное описание.
2. Предсказания квантовой механики носят статистический характер. Она предсказывает только средние значения большой серии испытаний для одинаково приготовленных систем.
3. Динамические переменные описываются с помощью операторов так, что их (наблюдаемые) средние значения определяются соотношением вида (1.4)

$$\langle A(t) \rangle = \int d^3x \psi^*(x) \hat{A} \psi(x).$$

4. **Принцип суперпозиции:** если могут реализоваться состояния, описываемые волновыми функциями $\psi_1(\mathbf{x}, t)$ и $\psi_2(\mathbf{x}, t)$, то может реализоваться и любая их линейная комбинация $c_1\psi_1(\mathbf{x}, t) + c_2\psi_2(\mathbf{x}, t)$.
5. **Принцип соответствия:** результаты должны переходить в классические, когда величины размерности действия много больше \hbar .
6. **Пакетность:** волновые функции обычно сосредоточены в более или менее локализованных волновых пакетах (В. М. Галицкий).

Три замечания к основным постулатам.

◇ При классическом описании состояние частицы задается конечным набором величин (координаты и импульсы). Квантовое же состояние задается бесконечным набором чисел — волновой функцией, заданной на всем пространстве координат, или импульсов, или еще каким-нибудь образом.

◇ Принцип суперпозиции означает, что уравнение, описывающее эволюцию волновой функции со временем, должно быть линейным по ψ (см. гл. 2).

◇ Постулат пакетности обычно не упоминается в учебниках. Однако, он составляет фактическую основу применений квантовой механики в задачах рассеяния, см. гл. 15, § 15.4.

◆ **Доказано**, что не существует динамической теории классического типа, содержащей некоторые пока неизвестные нам переменные (скрытые параметры), в которой все результаты предсказываются однозначно, а квантовая механика с ее вероятностными предсказаниями возникает как результат усреднения по этим скрытым параметрам. В этом смысле вероятностный характер предсказаний квантовой теории принципиально отличается от классического

случая, в котором статистическая неопределенность возникает просто от недостаточности или неточности нашего знания.

§ 1.3. Операторы физических величин I

Не существует универсального способа, позволяющего построить квантовый оператор, соответствующий известной классической величине, поскольку детали порядка \hbar неразличимы в классическом пределе. Часто используют следующее правило.

Если классическая физическая величина известным образом определяется через координаты и импульсы частицы, то оператор соответствующей квантовой величины определяется тем же соотношением со всеми возможными перестановками между \hat{x} и \hat{p} . Так, с классической величиной px сопоставляют обычно оператор $(\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p})/2$.

■ Как известно, **собственные значения λ и собственные функции ψ_λ оператора \hat{A}** — это решения уравнения

$$\hat{A}\psi_\lambda(x) = \lambda\psi_\lambda(x). \quad (1.5)$$

■ Вообще, если определено действие какого-то оператора \hat{G} , то функция от этого оператора $F(\hat{G})$ определяется следующим образом. Разложим функцию $F(g)$ в ряд Маклорена: $F(g) = \sum f_n g^n$. Тогда

$$F(\hat{G}) \stackrel{\text{def}}{=} \sum f_n (\hat{G})^n, \quad f_n = \left. \frac{1}{n!} \frac{d^n f}{dg^n} \right|_{g=0}. \quad (1.6)$$

Таким способом определяется и произвольная функция от оператора координаты или импульса. В частности, действие оператора \hat{p}^2 сводится к двукратному последовательному действию оператора \hat{p} . Определение функции от оператора, пригодное и для случаев, когда разложение в ряд неприменимо, дано в (1.22).

◇ В нижеследующих *примерах* мы описываем различные операторы в «естественном» для начального употребления координатном представлении (см. подробнее дальше) и находим собственные значения и собственные функции для некоторых из них.

- *Оператор координаты \hat{x}* сводится к умножению на x . Оператор $\hat{U}(x)$ любой функции от координат $U(x)$ сводится к умножению на $U(x)$. Собственные значения x_0 и собственные функции $\psi_0(x)$ находятся из уравнения

$$\hat{x}\psi_0(x) \equiv x\psi_0(x) = x_0\psi_0(x).$$

Отсюда следует, что $\psi_0(x) = \delta(x - x_0)$, а собственное значение x_0 может быть любым действительным числом.

- *Оператор импульса*

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla : \quad (1.7)$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}.$$

Собственные значения p и собственные функции $\psi_p(x)$ находятся из уравнения $\hat{p}\psi_p(x) \equiv -i\hbar d\psi_p(x)/dx = p\psi_p(x)$. Отсюда следует, что собственные функции

импульса имеют вид плоских волн $\psi_p(x) = e^{ipx/\hbar}$, а собственное значение p может быть любым действительным числом.

- Оператор энергии (гамильтониан)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x). \quad (1.8a)$$

Как мы увидим в гл. 2, этот оператор определяет эволюцию системы со временем

$$\hat{H} = i\hbar d/dt. \quad (1.8b)$$

В этом отношении он сходен с оператором импульса¹.

- Оператор момента импульса

$$\hat{\mathbf{L}} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}]: \quad (1.9)$$

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x.$$

- Оператор вероятности найти частицу вблизи точки \mathbf{x}_0 в объеме dV

$$\hat{P}(\mathbf{x}_0, dV) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)dV. \quad (1.10)$$

Вероятность найти частицу в объеме dV вблизи точки x_0 есть

$$d\omega = \mathcal{P}(\mathbf{x}_0)dV = \int \psi^*(\mathbf{x})\hat{P}(\mathbf{x}_0, dV)\psi(\mathbf{x})d^3x = |\psi(\mathbf{x}_0)|^2dV,$$

т. е. плотность вероятности найти частицу в точке x_0 есть $|\psi(\mathbf{x}_0)|^2$. (Это равенство используют иногда как объяснение физического смысла ψ -функции.)

◇ Условие нормировки

$$\int \psi^*(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d^3x = 1 \quad (1.11)$$

означает просто, что в объеме есть только одна частица. Действительно, в соответствии с (1.4) среднее значение x равно $\langle x \rangle = \int x d\omega = \int x |\psi(x)|^2 dx$, и среднее значение любой функции $F(x)$ есть

$$\langle F(x) \rangle = \int \psi^*(x)F(x)\psi(x)d\mathbf{x}.$$

Вероятностный характер предсказаний квантовой механики можно проиллюстрировать на примере дифракции света, проходящего через пару отверстий. Один фотон, пройдя через эти отверстия, в конце концов взаимодействует с одним светочувствительным ионом пластинки и даст на ней темное пятнышко. Положение этого пятнышка нельзя предсказать точно, можно только указать, какова вероятность его появления. Точно так же нельзя предсказать и положение пятнышка от другого фотона. Дифракционная картина возникает как сумма пятнышек от множества отдельных фотонов, распределение плотностей почернения отвечает упоминавшемуся распределению вероятностей, которое можно предсказать (ср. подробнее разд. 16.4.3).

¹В уравнении Гамильтона–Якоби в классической механике время и энергия выступают как пара канонически сопряженных координат, подобно паре координата — импульс.

Возникает естественный на первый взгляд вопрос, нельзя ли в каждом случае указать по положению пятна на фотопластинке: этот фотон прошел через отверстие 1, следующий — тоже через 1, а этот — через отверстие 2. Хорошо известно, что это не так — дифракционная картина при прохождении пары отверстий не совпадает с суммой картин от каждого из отверстий.

§ 1.4. Векторы состояний и волновые функции

Рассмотрим фурье-образ волновой функции $\psi_a(x)$, т. е. ее разложение по плоским волнам $e^{ipx/\hbar}$ (1.1), описывающим состояния с определенным импульсом p :

$$\begin{aligned}\tilde{\psi}_a(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \psi_a(x) e^{-ipx/\hbar} dx, \\ \psi_a(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int \tilde{\psi}_a(p) e^{ipx/\hbar} dp.\end{aligned}\tag{1.12}$$

При условии (1.11) имеем также $\int |\tilde{\psi}_a(p)|^2 dp = 1$. Вероятность $d\omega$ найти частицу с импульсом p пропорциональна $|\tilde{\psi}_a(p)|^2$, при этом $d\omega/dp = |\tilde{\psi}_a(p)|^2$, и для произвольной $F(p)$ среднее $\langle F(p) \rangle = \int \tilde{\psi}_a^*(p) F(p) \tilde{\psi}_a(p) dp$.

В обеих функциях ψ_a и $\tilde{\psi}_a$ содержится одна и та же (полная) информация о состоянии a , необходимо только сообщить, в каком базисе записана эта функция (в координатном или в фурье-импульсном).

Как и в нашем трехмерном мире, в мире волновых функций надо различать вектор и его запись в различных базисах. Вектор можно задавать, не прибегая к конкретному базису; например, вектор \mathbf{a} длиной в один метр, направленный от заданной точки на Полярную звезду. В каком-нибудь избранном базисе X такой вектор записывается как тройка чисел — его проекций на оси, $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)_X$, в другом базисе Y тот же вектор определяется другой тройкой чисел $\mathbf{a} = (a'_1, a'_2, a'_3)_Y$ (и второй набор можно получить из первого с помощью универсального правила — линейного преобразования, коэффициенты которого не зависят от вектора \mathbf{a}). Подобным образом состояние квантовой системы определяется **вектором состояния** $|\mathbf{a}\rangle$, где значок a — метка состояния, а, например, $\psi_a(x)$ — запись этого вектора в координатном базисе. Нередко состояния «нумеруют» значениями классических и квантовых параметров в этом состоянии, $a = (a_1, a_2, \dots)$. По традиции этот вектор называют кет-вектором. Сопряженный с ним вектор называют вектором бра (вместе они образуют слово *bracket*). (Это — аналоги б-компонентной строки F и б-компонентного столбца F^\dagger в электродинамике.) **Набор чисел, описывающих вектор состояния в избранном базисе, называют волновой функцией состояния. Сопряженный вектор описывается набором чисел, которые получаются из указанного набора посредством комплексного сопряжения.** В частности, в предыдущем примере $\psi_a(x)$ и $\tilde{\psi}_a(p)$ — волновые функции состояния $|\psi\rangle$ в координатном и импульсном базисах соответственно.

Векторы состояний $|A\rangle$ и $\alpha|A\rangle$, где $\alpha \neq 0$ — некоторое число, определяют одно и то же состояние. Ниже мы всегда имеем в виду некоторым образом нормированные

векторы состояний $|A\rangle$ и $|B\rangle$, в этом случае коэффициент α исчезает при нормировке. В суперпозиции векторов состояний $\alpha|A\rangle + \beta|B\rangle$ смысл имеет только отношение коэффициентов β/α .

◇ *Примеры:*

$|\mathbf{p}\rangle \equiv |\psi_{\mathbf{p}}\rangle$ — вектор состояния частицы с импульсом \mathbf{p} ;

$|\mathbf{r}\rangle \equiv |\psi_{\mathbf{r}}\rangle$ — вектор состояния частицы, локализованной в точке \mathbf{r} ;

нередко состояния дискретного спектра системы нумеруют в порядке возрастания их энергии, начиная с нуля. Тогда вектор n -го состояния часто обозначают $|n\rangle$.

■ Все возможные векторы состояний *кет* образуют линейное Гильбертово пространство состояний рассматриваемой системы, а сопряженные векторы *бра* — сопряженное Гильбертово пространство. Скалярное произведение векторов состояний $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$ обозначают как $\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi\rangle^*$. Если вектор состояния задан в координатном базисе, то

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int \psi^*(x)\varphi(x)dx. \quad (1.13)$$

◆ В пространстве векторов состояний можно выбрать **полный набор** ортонормированных векторов состояний $|f_i\rangle$, таких что¹ $\langle f_i|f_j\rangle = \delta_{ij}$. (Если индекс i , нумерующий векторы состояний, принимает непрерывный ряд значений, то символ δ_{ij} заменяется на $\delta(i-j)$, а суммы — на интегралы.) Набор $|f\rangle$ образует **базис** векторного пространства. Далее буква f будет «значком» выбранного базиса, индекс i перечисляет векторы из этого базиса, фигурные скобки обозначают слово *совокупность*. Так, $\{|f_i\rangle\}$ — совокупность всех векторов $|f_i\rangle$, т. е. базис f .

В квантовой механике выбор базиса называют выбором представления, и надо научиться переходить от одного представления (базиса) к другому. Ранее обсуждались координатное и импульсное представления.

Заметим, что понятие полноты системы может меняться от задачи к задаче. Это ясно видно на примере координатного представления. Для состояний частицы в конечном объеме кубической формы с размером a полный набор составляет совокупность плоских волн с волновыми числами $k = \pi n/a$, где n — целое число, возможные значения k образуют счетное множество. Для неограниченного пространства полный набор состояний можно задать с помощью плоских волн, волновое число которых k пробегает непрерывный ряд значений. В этом случае мощность множества значений k — континуум.

◆ Определим новый объект — **проекционный оператор $\hat{\mathcal{P}}_i$ для состояния $|f_i\rangle$** (он же — **оператор проектирования на состояние $|f_i\rangle$**). Его действие на произвольный вектор состояния $|a\rangle$ сводится к выделению из $|a\rangle$ составляющей, направленной вдоль $|f_i\rangle$

$$\hat{\mathcal{P}}_i \stackrel{def}{=} |f_i\rangle\langle f_i| \quad (1.14)$$

¹Значительная часть последующих рассуждений предполагает дискретность набора собственных состояний. Это оправдано, если система помещена в конечный объем (например, внутри куба со стороной \mathcal{L}). Предельный переход $\mathcal{L} \rightarrow \infty$ превращает набор состояний в непрерывный. Иногда при таком переходе описание по-настоящему усложняется. Мы не обсуждаем эти вопросы далее.

(без суммирования по значениям i).

◇ *Пример.*

В двумерном мире $\mathbf{a} = a_1 \mathbf{e}_1 + a_2 \mathbf{e}_2$. Пусть $|f_1\rangle = |\mathbf{e}_1\rangle$ и $|f_2\rangle = |\mathbf{e}_2\rangle$. Тогда $\hat{\mathcal{P}}_1|\mathbf{a}\rangle = |\mathbf{e}_1\rangle\langle\mathbf{e}_1|\mathbf{a}\rangle = \mathbf{e}_1(\mathbf{e}_1\mathbf{a}) \equiv a_1|\mathbf{e}_1\rangle$, т. е. \mathcal{P}_1 действует как оператор проектирования на ось 1.

При суммировании по полному набору векторов состояния i получается единичный оператор (вне зависимости от конкретного базиса f):

$$\sum_i \hat{\mathcal{P}}_i = \sum_i |f_i\rangle\langle f_i| = \hat{1}. \quad (1.15)$$

■ Волновые функции

Мы уже говорили о волновых функциях в координатном и импульсном представлениях. Вообще, вектор состояния $|\psi\rangle$ можно описать его проекциями $\langle f_i|\psi\rangle$ на базис $|f_i\rangle$ (как трехмерный вектор — его проекциями на координатные оси):

$$|\psi\rangle = \sum_i |f_i\rangle\langle f_i|\psi\rangle.$$

Набор проекций $\langle f_i|\psi\rangle \equiv \psi(f_i)$ для всех векторов $|f_i\rangle$ из базиса $|f\rangle$ называется волновой функцией состояния $|\psi\rangle$ в f -представлении. Если базис составляют собственные функции оператора какой-нибудь физической величины F , то говорят о F -представлении и о волновых функциях в этом представлении.

В частности, «наивная» запись $\psi(x)$ или $\tilde{\psi}(p)$ описывает волновую функцию соответственно в координатном или импульсном представлении, значки x и p обозначают здесь как вид используемого представления, так и набор чисел — значений x и p . Подобные обозначения нередко используют и для других представлений.

◆ Преобразование волновой функции к другому представлению описывается цепочкой равенств:

$$\psi(g) = \left\{ \sum_j U_{ji}^{fg} \psi(f_j) \right\} \equiv \left\{ \sum_j \langle g_i|f_j\rangle \langle f_j|\psi\rangle \right\} = \{ \langle g_i|\psi\rangle \},$$

$$U_{ji}^{fg} \equiv \langle g_i|f_j\rangle. \quad (1.16)$$

Набор чисел U_{ji}^{fg} определяет связь двух базисов (подобно матрицам преобразования систем координат в трехмерном мире, строящимся из косинусов и синусов углов поворота осей). Эти числа образуют матрицу преобразования U^{fg} (матричное представление оператора преобразования \hat{U}^{fg}).

◆ При измерении величины F в состоянии $|\psi\rangle$ получается одно из собственных значений f оператора \hat{F} с вероятностью $|\psi(f)|^2$. Именно поэтому волновую функцию $\psi(f)$ называют еще и *амплитудой вероятности*. В частности, пусть существует полная ортонормированная система собственных векторов $|f_{mn}\rangle$ оператора какой-нибудь физической величины \mathcal{M} с собственными значениями m_n так, что $\mathcal{M}|f_{mn}\rangle = m_n|f_{mn}\rangle$. Разложим произвольный волновой вектор системы $|\psi\rangle$ по этим собственным функциям: $|\psi\rangle = \sum_n c_n |f_{mn}\rangle$ (при этом $c_n = \langle f_{mn}^*|\psi\rangle$). Тогда величина

$|c_n|^2$ — вероятность найти систему в состоянии $|f_{mn}\rangle$, т. е. наблюдать собственное значение m_n величины M .

Пример. Волновая функция частицы с определенным импульсом в координатном представлении

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar} (2\pi\hbar)^{-3/2}.$$

Для любой волновой функции с учетом $\langle r | p \rangle = \langle p | r \rangle^*$ имеем

$$\psi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \int d^3\mathbf{r} \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \int d^3r \frac{e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi(\mathbf{r}),$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \int d^3p \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \int d^3p \frac{e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi(\mathbf{p}).$$

§ 1.5. Операторы II

Если задан способ, которым любой из векторов состояния преобразуется в другой вектор состояния $|\phi\rangle = \hat{G}|\psi\rangle$, то говорят, что задан оператор \hat{G} . В квантовой механике рассматриваются обычно линейные операторы:

$$\hat{G}(a_1\psi_1(x) + a_2\psi_2(x)) = a_1\hat{G}\psi_1(x) + a_2\hat{G}\psi_2(x).$$

• Рассмотрим какой-нибудь базис $|f_i\rangle$ в пространстве состояний. Действие оператора \hat{G} на функцию из этого базиса дает новую функцию, которую мы опять разложим по тому же базису:

$$\hat{G}|f_i\rangle = \sum_j G_{ij}^f |f_j\rangle.$$

Чтобы найти коэффициенты этого разложения G_{ij}^f , образуем, как обычно, скалярное произведение получившегося вектора на какой-нибудь вектор из этого же базиса $|f_k\rangle$. Считая наш базис ортонормированным, получим (после переобозначений) выражения для этих коэффициентов. Кроме того, запишем и специфическое представление оператора в нашем базисе:

$$G_{ij}^f \stackrel{\text{def}}{=} \langle f_i | \hat{G} | f_j \rangle; \quad \hat{G} | f_i \rangle = \sum_j G_{ij}^f | f_j \rangle; \quad \hat{G} = \sum_{i,j} | f_i \rangle G_{ij}^f \langle f_j |. \quad (1.17)$$

Числа G_{ij}^f образуют *матричное представление оператора \hat{G}* в базисе $|f_i\rangle$. Можно сказать, что матрица G_{ij}^f — это оператор \hat{G} в f -представлении.

В этом базисе волновой вектор некоторого состояния $|\psi\rangle$ задается своей волновой функцией, которую можно понимать как столбец $\psi_i \equiv \psi(f_i)$ (а сопряженную функцию — как строку $\psi_j^* \equiv \psi^*(f_j)$). Действие оператора на волновую функцию в этом представлении описывается как

$$G^f[\psi(f)] \equiv \langle f_i | \hat{G} | \psi \rangle = \sum_j G_{ij}^f \psi(f_j).$$

◆ Чтобы найти матричное представление нашего оператора в другом базисе $|g\rangle$, повторим предыдущую процедуру и с учетом (1.16) получим

$$\begin{aligned}\hat{G} &= \sum_{k,l} |g_l\rangle G_{kl}^g \langle g_k| \Rightarrow \\ \Rightarrow G_{kl}^g &= \sum_{i,j} \langle g_l | f_i \rangle G_{ij}^f \langle f_j | g_k \rangle \equiv \sum_{i,j} U_{li}^{*fg} G_{ij}^f U_{jk}^{fg}.\end{aligned}$$

Появившиеся здесь числа U_{ki}^{*fg} образуют матричное представление оператора преобразования $(\hat{U}^{fg})^\dagger$, получающееся из матрицы \hat{U}^{fg} транспонированием и комплексным сопряжением. Говорят, что оператор $(\hat{U}^{fg})^\dagger$ эрмитово сопряжен оператору \hat{U}^{fg} . Если $|g_k\rangle$ и $|f_i\rangle$ — ортонормированные базисы, то

$$(\hat{U}^{fg})^\dagger \hat{U}^{fg} = \hat{1} \Rightarrow (\hat{U}^{fg})^\dagger = (\hat{U}^{fg})^{-1}. \quad (1.18)$$

Такие матрицы (и операторы) называют *унитарными*, для них оператор $(\hat{U}^{fg})^\dagger$ является оператором обратного преобразования.

Мы не обсуждаем ниже неунитарные преобразования, искажающие нормировку (например, такие, как масштабное преобразование — одновременная растяжка всех осей в несколько раз).

◇ *Примеры.*

- В импульсном представлении матрица оператора импульса имеет вид $\langle \mathbf{q} | \hat{p} | \mathbf{p} \rangle = \mathbf{p} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{p})$; в координатном представлении

$$\langle \mathbf{r}' | \hat{p} | \mathbf{r} \rangle = \int d^3 p d^3 q \psi_{\mathbf{r}'}^*(\mathbf{q}) \mathbf{p} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{p}) \psi_{\mathbf{r}}(\mathbf{p}) = i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right].$$

Действие этого оператора на волновую функцию $\psi(\mathbf{r})$ сводится к дифференцированию

$$\int d^3 r' \langle \mathbf{r} | \hat{p} | \mathbf{r}' \rangle \psi(\mathbf{r}') = -i\hbar \partial \psi(\mathbf{r}) / \partial \mathbf{r}.$$

Соответственно, $\hat{p}(p) = \mathbf{p}$, $\hat{p}(r) = -i\hbar \partial / \partial \mathbf{r}$.

- Аналогично, для оператора координаты мы имеем

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r}' | \hat{r} | \mathbf{r} \rangle &= \mathbf{r} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}); \quad \langle \mathbf{p}' | \hat{r} | \mathbf{p} \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p}), \\ \int d^3 p' \langle \mathbf{p} | \hat{r} | \mathbf{p}' \rangle \psi(\mathbf{p}') &= i\hbar \partial \psi(\mathbf{p}) / \partial \mathbf{p}.\end{aligned}$$

В соответствии с этим, $\hat{r}(r) = \mathbf{r}$, $\hat{r}(p) = i\hbar \partial / \partial \mathbf{p}$.

Видно, что во всех этих представлениях матрицы операторов \hat{r} и \hat{p} пропорциональны δ -функции или ее производной:

$$G_{ff'} = G_s(f) \delta(f - f').$$

■ Эрмитовы операторы

Назовем оператор \hat{B} эрмитово сопряженным с оператором \hat{G} ($\hat{B} = \hat{G}^+$), если соотношение $\int (\hat{B}\psi_1)^* \psi_2 dx = \int \psi_1^* \hat{G}\psi_2 dx$ справедливо для любых двух функций ψ_1 и ψ_2 . (В матричной записи оператор \hat{G}^+ получается из \hat{G} посредством транспонирования и комплексного сопряжения). Оператор называется эрмитовым (или

самосопряженным), если $\hat{G} = \hat{G}^+$, т. е. если оператор совпадает со своим эрмитово сопряженным, или в (1.17) $G_{ji} = G_{ij}^*$. (Сравните с эрмитовыми матрицами в алгебре).

Среднее значение физической величины A по любому состоянию вещественно, т. е.

$$\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dx = \langle A \rangle^* = \int \psi^* \hat{A}^+ \psi dx.$$

Т. к. ψ — произвольная функция, это означает, что $\hat{A} = \hat{A}^+$, т. е.

$$\boxed{\text{оператор физической величины — эрмитов.}} \quad (1.19)$$

■ Некоммутативность операторов, коммутаторы

Результат последовательного действия операторов на волновую функцию может зависеть от порядка действия; вообще говоря, $\hat{A}\hat{B}\psi(x, t) \neq \hat{B}\hat{A}\psi(x, t)$. В этом случае говорят, что операторы \hat{A} и \hat{B} не коммутируют друг с другом.

Пример.

$$\begin{aligned} \hat{p}\hat{x}\psi(x, t) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x\psi(x, t)) \equiv -i\hbar(\psi + x\psi') \neq \\ &\neq \hat{x}\hat{p}\psi(x) \equiv -i\hbar x \frac{\partial \psi}{\partial x} \equiv -i\hbar x\psi'. \end{aligned}$$

Поэтому $(\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p})\psi(x) = -i\hbar\psi(x)$ для любой функции $\psi(x)$. Следовательно, можно записать операторное равенство

$$[\hat{p}, \hat{x}] \equiv \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = -i\hbar. \quad (1.20)$$

▼ Коммутатор $i\hat{C}$ операторов \hat{A} и \hat{B} определяется соотношением¹

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hat{C}. \quad (1.21)$$

■ Подробнее о собственных значениях и собственных векторах. Собственные значения λ оператора \hat{A} определяются из решения задачи о собственных значениях, т. е. из уравнения (1.5) $\hat{A}|\psi_\lambda\rangle = \lambda|\psi_\lambda\rangle$.

Собственные значения эрмитова оператора вещественны. Действительно, $\int \psi_\lambda^* \hat{A} \psi_\lambda dx = \int (\hat{A} \psi_\lambda)^* \psi_\lambda dx \rightarrow \lambda = \lambda^*$.

Собственные функции, отвечающие разным собственным значениям эрмитова оператора, ортогональны. Действительно, домножив $\hat{A}\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda$ на ψ_μ^* слева, а $(\hat{A}\psi_\mu)^* = \mu\psi_\mu^*$ на ψ_λ справа и проинтегрировав, получим $\lambda \int \psi_\mu^* \psi_\lambda dx = \mu \int \psi_\mu^* \psi_\lambda dx$, т. е. $\int \psi_\mu^* \psi_\lambda dx = 0$ при $\mu \neq \lambda$.

Если одному собственному значению λ соответствует несколько независимых собственных функций, то говорят, что это значение λ соответствует **вырожденному** состоянию. В случае вырождения можно *выбрать* собственные функции ортогональными. Поэтому в любом случае можно принимать за базис ортонормированную систему собственных функций какого-нибудь оператора $\int \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn}$.

¹Коммутаторы универсальным образом соотносятся со скобками Пуассона в классической механике. Пусть скобки Пуассона двух физических величин есть $\{A, B\} = D$, тогда для коммутатора соответствующих операторов имеет место соотношение $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar D$ (см. пример в связи с задачей об осцилляторе § 4.1). Иногда это соответствие становится основой процедуры квантования некоторых систем.

- Набор собственных функций $\psi_n(x)$ эрмитова оператора полон:

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

$$F(x) = \int dx' F(x') \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') \rightarrow \sum_n \psi_n(x) \psi_n^*(x') = \delta(x - x').$$

(Здесь не выписаны индексы, напоминающие об операторе, собственными функциями которого являются $\psi_n(x)$.)

◇ Полнота системы собственных функций эрмитова оператора \hat{G} позволяет дать *новое определение функции от оператора* $f(\hat{G})$.

Пусть система собственных функций и значений этого оператора определяется соотношениями $\hat{G}\psi_n = G_n\psi_n$. Тогда действие оператора $f(\hat{G})$ на произвольную волновую функцию ψ определяется следующим образом. Запишем сначала разложение этой волновой функции по собственным функциям оператора \hat{G} : $\psi = \sum_n a_n \psi_n$. Тогда

$$f(\hat{G})\psi = \sum_n a_n f(G_n)\psi_n. \quad (1.22)$$

§ 1.6. Одновременная измеримость и полный набор наблюдаемых

Говорят, что **величины A и B одновременно измеримы**, если существует полная система векторов состояний $|\psi_n\rangle$, таких, что они являются одновременно собственными векторами \hat{A} и \hat{B} , т. е. $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$, $\hat{B}|\psi_n\rangle = b_n|\psi_n\rangle$.

В силу полноты системы $|\psi_n\rangle$, произвольное состояние $|\psi\rangle$ можно разложить по этому базису: $|\psi\rangle = \sum c_n |\psi_n\rangle$. При этом

$$\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = \sum_n c_n a_n b_n |\psi_n\rangle = \sum_n c_n b_n \hat{A}|\psi_n\rangle = \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle \Rightarrow (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle = 0.$$

Так как это равенство имеет место для произвольного вектора $|\psi\rangle$, то операторы \hat{A} и \hat{B} коммутируют, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Справедливо и обратное утверждение: если $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, то \hat{A} и \hat{B} имеют общую полную систему собственных функций, т. е. одновременно измеримы. Действительно, пусть $|\psi_a\rangle$ — собственный вектор оператора \hat{A} , т. е. $\hat{A}|\psi_a\rangle = a|\psi_a\rangle$. Тогда $\hat{B}\hat{A}|\psi_a\rangle = a\hat{B}|\psi_a\rangle = \hat{A}\hat{B}|\psi_a\rangle$, т. е. $\hat{B}|\psi_a\rangle$ есть также собственная функция \hat{A} с тем же собственным значением a . Если спектр не вырожден, отсюда следует, что $\hat{B}|\psi_a\rangle$ с точностью до множителя совпадает с $|\psi_a\rangle$, и, значит, $\hat{B}|\psi_a\rangle = b|\psi_a\rangle$, что и требовалось показать. В случае вырождения можно выбрать такие линейные комбинации $\sum c_i |\psi_{ia}\rangle$, которые будут собственными функциями \hat{B} .

Итак, **две физические величины одновременно измеримы тогда и только тогда, когда их операторы коммутируют.**

■ Полный набор наблюдаемых

Говоря о состоянии системы, далее мы имеем в виду, что оно определено каким-нибудь **полным набором величин (наблюдаемых)**, т. е. таким набором, который обладает следующими свойствами:

▼ все эти величины одновременно измеримы;

▼ в состоянии, где все эти величины имеют определенные значения, никакая другая величина (не являющаяся их функцией) не может иметь определенного значения.

Иными словами, в квантовой теории задать состояние системы — это значит сообщить о ней столько, что любые дополнительные сведения могут быть включены лишь ценой потери некоторых из уже включенных [12].

§ 1.7. Оператор конечного сдвига, оператор импульса

Покажем теперь на примере, как получаются выражения для операторов некоторых физических величин. Для этого мы рассмотрим достаточно гладкую функцию $f(x)$ и определим оператор \hat{T}_a сдвига координат на величину a соотношением

$$\hat{T}_a f(x) = f(x + a). \quad (1.23)$$

Разложим сдвинутую функцию в ряд Тейлора:

$$f(x + a) = f(x) + a \frac{d}{dx} f(x) + \frac{a^2}{2!} \left(\frac{d}{dx} \right)^2 f(x) + \frac{a^3}{3!} \left(\frac{d}{dx} \right)^3 f(x) + \dots \equiv \exp \left(a \frac{d}{dx} \right) f(x).$$

Таким образом, можно записать **оператор конечного сдвига**

$$\hat{T}_a = e^{a(d/dx)}. \quad (1.24a)$$

• Если система обладает трансляционной инвариантностью, т. е. ее свойства не меняются при сдвиге, импульс системы сохраняется. И наоборот, импульс определяется как величина, которая сохраняется в силу трансляционной инвариантности. Эта инвариантность включает в себя и инвариантность относительно конечного сдвига (см. § 1.7). Поэтому оператор импульса \hat{p} коммутирует с оператором конечного сдвига, $[\hat{p}, \hat{T}_a] = 0$. Значит, естественно определить **оператор импульса** как $A \cdot d/dx$, и придумать, как зафиксировать коэффициент A .

Оператор наблюдаемой величины — импульса — эрмитов, т. е.

$$\int \psi^*(x) A (d/dx) \psi(x) dx = \int A^* ((d/dx) \psi^*(x)) \cdot \psi(x) dx.$$

Интегрирование по частям дает: $A = -A^*$. Поэтому число A — чисто мнимое, и $\hat{p}_x = -i\hbar d/dx$ (1.7). (Множитель \hbar получается из размерности и принципа соответствия, а знак «-» выбран в согласии со стандартной записью для плоской волны в виде $\exp[-i(\omega t - kx)]$.)

В частности, при этом получается используемое ниже выражение для оператора конечного сдвига, эквивалентное (1.24a)

$$\hat{T}_a = e^{ia\hat{p}/\hbar}. \quad (1.24b)$$

Ясно, что операции сдвига образуют группу (*Абелеву группу* — для знакомых с этой классификацией). Изложенное можно интерпретировать так, что сдвиги порождаются оператором импульса. Поэтому иногда говорят, что оператор импульса — *генератор* группы сдвигов.

Для свободного движения $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$, и $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$. Вследствие этого \hat{H} и \hat{T}_a имеют совместные собственные функции вида $\psi_{E,\lambda} = Ce^{ikx}$ с собственными значениями $E = \hbar^2 k^2/2m$ и $\lambda = e^{ika}$. Кроме того, и импульс коммутирует с \hat{H} и с \hat{T}_a и имеет в этом состоянии собственное значение $\hbar k$.

◇ *Вопрос. Для свободного движения нередко используют другие собственные функции $\psi = \cos kx$. Они не являются собственными функциями \hat{p} . Как это согласовать с предыдущим?*

§ 1.8. Соотношение неопределенностей

Обсудим сначала некоторые факты из теории преобразований Фурье, изучавшейся в курсе функционального анализа. Там рассматривались функция $f(x)$, определенная в «координатном» x -пространстве и ее Фурье-образ $\tilde{f}(k)$, определенный в пространстве Фурье-параметров k . Эти функции с одинаковой полнотой определяют одну и ту же реальность (в физике это могут быть электромагнитное поле, поля давлений и температур в газе и т. п.). На том языке, которым мы владеем теперь, эти функции можно трактовать как представления единого «вектора состояния физической реальности» в x -пространстве и k -пространстве соответственно. Доказывается фактически, что возможности одновременной фиксации какого-нибудь объекта в этих двух пространствах взаимосвязаны в нижеследующем смысле. Определим средние значения и дисперсии координаты x и параметра Фурье k соотношениями

$$\langle x \rangle = \int x |f(x)|^2 dx / \int |f(x)|^2 dx, \quad \Delta x^2 = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle,$$

$$\langle k \rangle = \int k |\tilde{f}(k)|^2 dk / \int |\tilde{f}(k)|^2 dk, \quad \Delta k^2 = \langle (k - \langle k \rangle)^2 \rangle,$$

Тогда произведение дисперсий $\Delta x \Delta k$ ограничено снизу неравенством $\Delta x \Delta k \geq 1/2$, которое в физике называют соотношением неопределенностей.

Подобные неравенства в электродинамике и акустике выглядят как соотношения неопределенностей (*координата — волновой вектор*) и (*время — частота*). В современных курсах электромагнетизма обсуждаются эти соотношения и их физический смысл; использование этих соотношений позволяет выполнить некоторые важные оценки. Большинство полученных при этом выводов с очевидным изменением терминологии переносится и на квантовую механику. Ниже мы доказываем и обсуждаем подобные соотношения для квантово-механических систем.

◆ Рассмотрим пару эрмитовых операторов \hat{A} и \hat{B} , причем $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$. Определим дисперсию величины A в состоянии $|n\rangle$: $\Delta A = \sqrt{\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle}$. Выбрав какое-то состояние $|n\rangle$, определим операторы

$$\hat{A}_1 = \hat{A} - \langle A \rangle \text{ и } \hat{B}_1 = \hat{B} - \langle B \rangle.$$

Легко проверить, что $[\hat{A}_1, \hat{B}_1] = i\hat{C}$ и $\langle \hat{A}_1^2 \rangle = \Delta A^2$, $\langle \hat{B}_1^2 \rangle = \Delta B^2$. Образуем теперь состояние $|m\rangle = (\alpha \hat{A}_1 + i \hat{B}_1)|n\rangle$ и вычислим величину

$$\begin{aligned} \langle m|m \rangle &\equiv J(\alpha) = \langle n | (\alpha \hat{A}_1 - i \hat{B}_1) (\alpha \hat{A}_1 + i \hat{B}_1) | n \rangle = \\ &= \langle n | \left\{ \alpha^2 \hat{A}_1^2 + i \alpha (\hat{A}_1 \hat{B}_1 - \hat{B}_1 \hat{A}_1) + \hat{B}_1^2 \right\} | n \rangle = \\ &= \alpha^2 (\Delta A)^2 - \alpha \langle C \rangle + (\Delta B)^2. \end{aligned}$$

По определению, получившаяся величина $J(\alpha)$ неотрицательна. Но это — квадратичная форма по α , т. е. ее дискриминант не может быть положительным, иначе говоря, должно быть

$$4(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \langle C \rangle^2.$$

Итак, имеет место **соотношение неопределенностей**:

$$[A, B] = iC \Rightarrow \Delta A \cdot \Delta B \geq |\langle C \rangle|/2. \quad (1.25)$$

В частности,

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2. \quad (1.26)$$

◆ Соотношения неопределенностей имеют еще и такое толкование.

Состояние системы (вектор состояния) может быть описано с помощью волновых функций и в \hat{A} - и в \hat{B} -представлении (т. е. в представлениях собственных векторов этих операторов). Каждая из этих функций описывает свойства одной и той же физической системы. Поэтому естественно, что некоторые интегральные характеристики этих описаний (в нашем случае дисперсии) взаимосвязаны. Эта связь и дается соотношением неопределенностей. Иными словами, в квантовой теории соотношения неопределенностей являются следствием того, что физические величины описываются операторами, и эти операторы, вообще говоря, не коммутируют.

◆ Соотношение (1.25) означает, что в состоянии с разбросом ΔA в величине A разброс ΔB в величине B не меньше, чем $|\langle C \rangle|/(2\Delta A)$. Не может существовать состояний с лучшей локализацией. В частности, для квантовой частицы не существует понятия траектории, можно указать лишь *трубку неопределенностей*, внутри которой движется частица (расплывающийся волновой пакет). Согласно простейшей трактовке, невозможно одновременно измерить импульс и координату с высокой точностью, и соотношение неопределенностей ограничивает снизу погрешность этих измерений. Если приготовлено состояние, в котором частица локализована в небольшой области обычного пространства, то она быстро делокализуется за счет разброса в импульсах. Например, если свободный электрон локализовать в объеме радиуса 10^{-8} см, то через секунду он почти равновероятно может быть найден в области радиусом 1500 км (а неопределенность положения макроскопического объекта — шарика от пинг-понга — увеличится на 1% за миллиарды лет).

Оператор энергии (гамильтониан) \hat{H} (1.8) определяет эволюцию системы во времени и соотносится со временем так же, как и оператор импульса с координатой. Поэтому имеет место и *соотношение неопределенностей энергия–время*

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \hbar/2. \quad (1.27)$$

Оно означает, в частности, что при измерении, длящемся время t , невозможно измерить энергию с точностью, лучшей чем \hbar/t . Полезно обсудить в этой связи переход системы из состояния с энергией E_i в состояние с энергией E_f под действием света с такой частотой ω , что выполняется закон сохранения энергии $\hbar\omega = E_f - E_i$. Если воздействие света на систему продолжается в течение конечного времени T , то сигнал не монохроматичен, спектр его частот размазан по интервалу шириной $\hbar/2T$, и с той же погрешностью нарушается закон сохранения энергии (см. подробный пример в гл. 14). Поэтому, в частности, в любых реальных переходах закон сохранения

энергии не выполняется точно. (Разумеется, это не противоречит возможности существования систем со строго определенной энергией.) Вообще, справедливость закона сохранения энергии в любом случае ограничена значением \hbar/T_{un} , где $T_{un} \sim 4 \times 10^{17}$ с. — время жизни Вселенной. Это существенно для явлений микромира, но для явлений окружающей нас жизни характерная величина нарушений чудовищно мала. Так, при наблюдении в течение 0,001 сек отклонения от закона сохранения энергии составляют $\sim 10^{-31}$ Дж! В большинстве классических задач подобная неопределенность превышает погрешность описания изолированной системы, доставляемому пренебрегаемым взаимодействием с окружением.

Для нестабильной частицы с временем жизни τ (для нее вероятность $|\psi|^2 \propto e^{-t/\tau}$) соотношение неопределенностей (1.27) означает, что энергия этой частицы не может быть определена с точностью, лучшей $\hbar/2\tau$, эта величина определяет *ширину* соответствующего уровня энергии (см. подробнее в разд. 2.4.5, 14.6.2).

◇ *Оценки.*

• Оценим энергию основного состояния гармонического осциллятора, $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) + m\omega^2 x^2/2$. Энергия есть среднее значение гамильтониана, т. е.

$$E = \langle \hat{H} \rangle \geq \frac{\Delta p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \Delta x^2}{2} \geq \frac{\hbar^2}{8m\Delta x^2} + \frac{m\omega^2 \Delta x^2}{2}.$$

Минимум последнего выражения как функции от Δx достигается при $\Delta x \equiv x_0 = \sqrt{\hbar/2m\omega}$, что дает точную нижнюю границу $E \geq \hbar\omega/2$.

• Для основного состояния электрона в атоме водорода $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) - e^2/r$ получаются не точные неравенства, а только оценки:

$$\begin{aligned} E = \langle \hat{H} \rangle &\geq \Delta p^2/(2m) - \langle e^2/r \rangle \gtrsim \Delta p^2/(2m) - e^2 \langle 1/\Delta r \rangle \gtrsim \\ &\gtrsim \hbar^2/(8m\Delta r^2) - e^2/\langle \Delta r \rangle \geq -2me^4/\hbar^2. \end{aligned}$$

Здесь, по аналогии с тем, что имеет место для компонент векторов, мы использовали справедливое только по порядку величины соотношение неопределенностей для длин векторов $\Delta r \Delta p \gtrsim \hbar$ и считали, что $\langle 1/r \rangle \approx 1/\Delta r$. Неудивительно, что и ответ совпадает с точным только по порядку величины (вчетверо больше).

■ **Концепция дополненности.** Соотношения неопределенностей послужили *Н. Бору* базой для формулирования общей концепции дополненности, реализующейся в Природе. *Существуют пары дополняющих друг друга понятий (объектов), одновременная полная реализация которых в Природе невозможна.*

Мы уже обсуждали невозможность одновременного наблюдения точных значений координаты и импульса в квантовой механике. Здесь дополнительными являются понятия координаты и импульса, связанные соотношением неопределенностей.

Концепция дополненности имеет и существенно более общее значение. Так, не существует ответа на вопрос, каково мгновенное значение частоты Вашего пульса сегодня в 11 часов 12 минут 37,555 секунды. Здесь дополнительными являются понятия частоты пульса и времени, необходимого для его измерения. (Обычно мы имеем дело со средним значением, но и оно зависит от предистории.)

Эту концепцию распространяют также и на явления органической и общественной жизни. Например, Вы не можете одновременно думать о каком-то содержательном объекте и пытаться постигнуть процесс этого размышления. Здесь дополнительными являются субъект и процесс размышления.

§ 1.9. Измерения в квантовой механике

Измерение — это процесс взаимодействия между квантовым объектом и классическим объектом (прибором), происходящий независимо от наблюдателя (Н. Бор)¹.

Измерительный прибор вносит изменения в наблюдаемую систему. Например, если измерять электрическое поле какого-то распределения зарядов, то само это распределение меняется под воздействием заряда, используемого для измерений.

В классической физике считают, что принципиально возможно так уменьшить влияние измерительного прибора, чтобы сделать пренебрежимо малыми изменения, вносимые этим прибором в измеряемую систему (в нашем случае — сделать величину измерительного заряда сколь угодно малой).

В квантовой механике воздействием измеряющего прибора пренебречь нельзя. «Согласно квантовому постулату, всякое наблюдение атомных явлений включает такое взаимодействие последних со средствами наблюдения, которым нельзя пренебречь» (Н. Бор). В частности, например, для измерения положения частицы нельзя обойтись менее, чем одним квантом света, и это существенно меняет величины квантового порядка малости. Подобным образом при измерении положения с погрешностью Δx электрон меняет свой импульс на величину $\geq \hbar/2\Delta x$. Измерение меняет состояние измеряемой системы, т. е. нельзя провести измерение, не «испортив» измеряемое состояние. Знание начального состояния позволяет вычислить только вероятность результата измерения. Воздействие измерения на состояние объекта тем сильнее, чем выше точность измерения.

Важное исключение составляет случай, когда с самого начала квантовая система находится в собственном состоянии $|a\rangle$ оператора измеряемой величины \hat{A} , т. е. $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$. Тогда измерение величины A даст значение a с вероятностью 1. Если оператор величины A со временем не меняется, то ее повторное измерение в состоянии $|a\rangle$ оставит систему в том же состоянии и даст опять то же собственное значение.

◇ После измерения физической величины A в состоянии $|\Psi\rangle$ система переходит в другое состояние $|\psi_{A_i}\rangle$ (происходит *редукция волнового пакета* в состояние $|\psi_{A_i}\rangle$), которое задается прибором, но обычно не является даже собственным вектором оператора \hat{A} . Можно предсказать лишь вероятность того, при этом обнаружатся значение A_i и состояние $|\psi_{A_i}\rangle$ нельзя. Повторное измерение той же величины даст, вообще говоря, другое значение A_j и другой вектор состояния $|\psi_{A_j}\rangle$, поскольку полученные состояния не были собственными состояниями оператора \hat{A} . Если повторить это измерение с копией нашей системы, получатся скорее всего другие состояния, с другими значениями A_i и A_j . В соответствии с постулатами квантовой теории, среднее значение величины A есть $\sum A_i |\langle \Psi | \psi_{A_i} \rangle|^2$. При повторном измерении меняется и это среднее значение.

◇ Разумеется, последовательные измерения координаты частицы, выполненные с конечной точностью, покажут близкие значения x_i , но не существует имеющего

¹Подобная независимость измерения от наблюдателя не реализуется для некоторых явлений в сложных системах, таких как общество (Дж. Сорос).

смысл скорости предела $\Delta x/\Delta t$ при уменьшении интервала времени между двумя измерениями $\Delta t \rightarrow 0$. Вообще, **в квантовой механике не существует понятия траектории частицы**. Это понятие можно определить только приближенно, наименьшая погрешность в этом понятии задается соотношением неопределенностей.

«Частица не имеет в действительности ни определенного импульса, ни определенного положения в пространстве; описание с помощью ψ -функции является в принципе полным описанием. Точное местоположение частицы, которое я получаю в результате его измерения, не может быть интерпретировано как местоположение частицы до измерения. Точная локализация, которая обнаруживается при измерении, будет проявляться только через неизбежное (не несущественное) воздействие измерения. Результат измерения зависит не только от реального положения частицы, но также и от принципиально неполного знания механизма измерения» (А. Эйнштейн). Отметим неточность: понятие *реальное положение частицы*, используемое в конце высказывания, в действительности не определено, как об этом говорилось в начале высказывания.

■ **Квантовое кодирование.** Прямой реализацией рассмотренных положений является идея квантового кодирования, ныне подготавливаемая к технической реализации.

Основой схемы является передача по линии связи сигнала в одноквантовой форме. Мы будем говорить здесь о передаче сигнала в виде последовательности фотонов одинаковой частоты, но имеющих разные циркулярные поляризации так, что, например, сигнал 10011010111 передается последовательностью фотонов *лппллл-плл*, где *л* отвечает левополяризованным фотонам, а *п* — правополяризованным. Далее используется тот факт, что любое наблюдение (со считыванием данных или простое запоминание) — измерение — вносит неконтролируемое изменение в этот сигнал.

С учетом этого одна из возможных схем передачи информации состоит из следующих этапов.

- Кодирование основного сообщения совершается обычным образом по какой-нибудь известной книге, например, по Библии. Секретным является выбор отрывка, используемого как база для кодирования. Поэтому либо этот отрывок должен быть согласован заранее, либо сообщение должно указывать положение этого отрывка (адрес). Разумеется, только второй способ может обеспечить секретность.
- По линии передается серия сигналов с адресами отрывков. Получатель посылает отправителю контрольные суммы полученных сигналов (и, может быть, еще чуть более сложные контрольные характеристики). У всех прочитанных на пути сообщений контрольные суммы не сходятся.
- Отправитель называет получателю номер сообщения с правильной контрольной суммой, т. е. адрес кодирующего отрывка, и отправляет соответствующим образом закодированное основное сообщение.

§ 1.10. Матрица плотности

Понятие волновой функции определяется только для изолированной системы. Если система не изолирована, следует начать с описания полной системы, волновая функция которой $\psi(x, X)$ зависит как от координат частиц системы x , так и от переменных, описывающих окружающие частицы (среду) X .

Рассмотрим физическую величину G , определенную для нашей системы (т. е. определяемую оператором $\hat{G}(x_j)$, зависящим только от переменных нашей системы x_j с матричным представлением в виде функции пар переменных $G(x_j, x'_j)$). Среднее значение этой физической величины, усредненное по состояниям полной системы (на это усреднение указывают ниже угловые скобки), есть

$$\begin{aligned} \langle G \rangle &= \langle \int \psi^*(x, X) \hat{G}(x) \psi(x, X) \prod dx dX \rangle \equiv \\ &\equiv \langle \int \psi^*(x, X) G(x, x') \psi(x', X) \prod dx dx' dX \rangle. \end{aligned} \quad (1.28)$$

Интегрирование по переменным X и усреднение по ним одинаковы для всех операторов, действующих только на переменные x , что приводит нас к понятию **матрицы плотности** (*Л. Д. Ландау*):

$$\rho(x', x) = \langle \int \psi(x, X) \psi^*(x', X) dX \rangle_T. \quad (1.29)$$

С ее помощью среднее значение нашей физической величины G записывается в виде

$$\langle G \rangle = \int G(x, x') \rho(x', x) dx dx'. \quad (1.30)$$

- Использование матрицы плотности является очень продуктивным при решении задач **квантовой статистической физики**. Здесь стартуют с волновой функции, которая определяется для полной изолированной системы. Например, для системы в термостате она зависит как от координат частиц системы x_i , так и от переменных частиц термостата X , $\psi \equiv \psi(\{x_i\}, X)$. При этом например к среднему (1.28) обычно приписывают значок T , означающий усреднение по состояниям термостата. Интегрирование по переменным термостата X и усреднение по его состояниям одинаковы для всех операторов, действующих только на переменные нашей системы x . Поэтому становится естественным описывать систему с помощью матрицы плотности (1.29).

Статистический оператор $\hat{\rho}$ связан с матрицей плотности так же, как матричная форма любого оператора $G(x, x')$ связана с его операторной формой \hat{G} (1.17). С помощью этого оператора среднее значение физической величины G записывается в виде суммы по всем возможным состояниям системы Tr :

$$\langle G \rangle = \int G(x, x') \rho(x', x) dx dx' \equiv \frac{1}{Z} Tr \hat{G} \hat{\rho}, \quad Z = Tr \hat{\rho}. \quad (1.31)$$

В частности, известное каноническое распределение Гиббса $w \propto e^{E/(kT)}$, где E — полная энергия нашей системы, переходит в квантовом случае в матрицу плотности $\hat{\rho} = e^{-\hat{H}/(kT)}$, где \hat{H} — оператор полной энергии, а T — температура.

• Если x — пространственные координаты, удобно перейти к их средним значениям $\tilde{x} = (x + x')/2$ и разностям, а затем выполнить преобразование Фурье по этим разностям (N — число частиц нашей системы):

$$\tilde{\rho}(\tilde{x}, p) = \frac{1}{(2\pi)^{3N/2}} \int \prod_{i=1}^N e^{-i \sum p_i (x_i - x'_i)} \hat{\rho}(x, x'). \quad (1.32)$$

Получившуюся матрицу плотности в смешанном (x, p) представлении называют *функцией Вигнера*. В квазиклассическом случае (см. § 5.3) она переходит в функцию распределения в фазовом пространстве (x, p) .

§ 1.11. Задачи

1. Найти $\psi(x, t)$ для пакета с $A(k) = A_0 \exp\left[-\frac{(k - k_0)^2}{4(\Delta k)^2}\right]$, для частиц с законами дисперсии $\omega = ck$ и $\omega = \hbar k^2/2m$. Сравнить с $\psi(x, 0)$. Вычислить размеры пакетов при $t = 1$ сек для электрона, первоначально локализованного в размере атома водорода 10^{-8} см, и для шарика от пинг-понга.
2. Для частицы в потенциальном ящике $U(x) = \{0 \forall x \in (-a, a), \infty \forall |x| > a\}$
 - найти уровни энергии E_n и волновые функции ψ_n ;
 - найти энергию основного состояния E_1 и n , соответствующее энергии $E_n \approx kT$, где $T=300$ К, оценить $(E_{n+1} - E_n)/E_n$ для этой энергии для
 - частицы массы $m=1$ г в ящике с $a \sim 1$ см,
 - электрона в ящике с $a \sim 10^{-8}$ см,
 - атома He в ящике с $a \sim 1$ см;
 - сравнить классическую плотность вероятности $d\omega/dx = 2/(v(x)T)$ с квантовой $d\omega/dx = |\psi_n(x)|^2$ при $n=1$ и $n \gg 1$; сделать то же для $d\omega/dp$;
 - найти вероятность пребывания частицы в области $0 < x < a/3$;
 - найти число энергетических уровней в интервале $(E, E + dE)$ при достаточно больших E ;
 - найти силу давления частицы на стенку;
 - найти работу, которую следует совершить для медленного сжатия ямы в ν раз.
3. Для двумерного потенциального ящика

$$U(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{при } -a < x < a, \quad -b < y < b; \\ \infty & \text{при } |x| > a \text{ или } |y| > b \end{cases}$$

- найти уровни энергии E_n и волновые функции ψ_n ;
 - отдельно рассмотреть случай квадратного ящика.
 - Найти плотность числа состояний при $E \gg \hbar^2/(2ma^2)$ для двумерной и одномерной ям.
4. Для частицы в кубическом ящике со стороной a , с непроницаемыми стенками, найти уровни энергии, волновые функции, плотность числа состояний при $E \gg \hbar^2/(2ma^2)$.

5. С какими наименьшими погрешностями можно определить скорости электрона и протона, локализованных в области размером 1 мкм, 10^{-8} см.
6. Используя соотношение неопределенностей в виде $\Delta p_r \Delta r \geq \hbar$ получить для энергии основного состояния атома водорода оценку

$$E_0 = -me^4/(2\hbar^2) = -mc^2\alpha^2/2 = -13,6 \text{ эВ.}$$
7. Оценить с помощью соотношения неопределенностей энергию основного состояния и неопределенность в положении по вертикали нейтрона в гравитационном поле Земли в этом состоянии. (Получить числа.)
8. Найти распределение по импульсам в основном состоянии атома водорода $\psi(r) = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/a}$.
9. Найти соотношение неопределенностей для Δx и ΔT , для ΔT и $\Delta U(x)$, где $\hat{T} = \hat{p}^2/(2m)$.
10. Для частицы в состоянии $\psi(x, y, z)$, найти вероятность того, что ее координата x и импульс p одновременно расположены в пределах $(x_1 < x < x_2)$ и $(p_1 < p_x < p_2)$ или $(p_1 < p_y < p_2)$.
11. Найти коммутаторы $[p_x, x]$, $[p_x, z]$.
12. Найти оператор $1/r$ в импульсном представлении (трехмерный случай).
13. Показать, что $[e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}] = \mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. Найти $[e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \hat{p}^2]$.
14. Покажите, что коммутатор двух эрмитовых операторов, становится эрмитовым после деления на i . (Такой оператор называют антиэрмитовым.)
15. Покажите, что для произвольного оператора \hat{A} среднее по любому состоянию $\langle \psi | \hat{A} \hat{A}^\dagger | \psi \rangle$ положительно.
16. Докажите соотношения (17.26), выражающие коммутатор $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}]$ через коммутаторы $[\hat{A}, \hat{B}]$ и $[\hat{A}, \hat{C}]$.
17. Найти $[\hat{B}, \hat{C}]$, в случае, когда $[\hat{C}, \hat{A}] = \lambda\hat{A}$ и $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$.
18. Для пары операторов \hat{A} и \hat{B} имеют место перестановочные соотношения $[\hat{A}, \hat{B}^2] = iC_1$ и $[\hat{A}^2, \hat{B}] = iC_2$, где C_1 и C_2 — числа. Показать, что это возможно лишь в том случае, когда $C_1 = C_2 = 0$.
19. Покажите, что имеет место тождество Якоби (17.27).
20. Покажите, что для коммутаторов между компонентами оператора момента импульса (1.9) и компонентами вектора A_i имеют место перестановочные соотношения (e_{ijk} — антисимметричный по всем индексам тензор (17.5))

$$[L_i, A_j] = ie_{ijk}A_k \quad (A_j = L_j, r_j \text{ или } p_j).$$

По аналогии с (1.7) можно ожидать, что $\hat{L}_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi$ (φ — угол вращения вокруг оси z). Исходя из этого, объясните, что означают полученные равенства для любого вектора \hat{A} при $i = 3$.

Глава 2

УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

§ 2.1. Основные факты

2.1.1. Уравнение Шредингера

Среди основных постулатов квантовой механики — утверждение, что волновая функция дает полную информацию о системе. Но если это так, то и эволюция системы во времени тоже должна определяться этой волновой функцией. Из принципа суперпозиции следует, что уравнение для эволюции волновой функции должно быть линейным, т. е. иметь вид $d\psi/dt = \hat{D}\psi$, где \hat{D} — некоторый оператор.

Чтобы догадаться, как выглядит этот оператор \hat{D} , используем принцип соответствия и вспомним выражение для плоской волны (1.1), $\psi = Ce^{i(\rho x - Et)/\hbar}$. Для такой функции дифференцирование по времени дает собственное значение оператора \hat{D} , равное $E/i\hbar$. Это — основание для догадки, что и в общем случае $\hat{D} = \hat{H}/i\hbar$, где \hat{H} — оператор Гамильтона (гамильтониан)¹ (1.8). В сущности, утверждение, что $\hat{D} = -i\hat{H}/\hbar$, представляет еще один постулат квантовой механики, но постулат «второго сорта», как все получаемые из принципа соответствия определения операторов физических величин. Итогом этих рассуждений является **уравнение для эволюции волновой функции со временем — уравнение Шредингера:**

$$i\hbar \frac{d\psi(\mathbf{r}, t)}{dt} = \hat{H}\psi \equiv \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.1)$$

Это уравнение сохраняет свой вид вне зависимости от используемого представления. Иными словами, это — уравнение для векторов состояния. Его основные свойства:

- уравнение Шредингера линейно: если $\psi_1(\mathbf{r}, t)$ и $\psi_2(\mathbf{r}, t)$ — решения уравнения Шредингера, то $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ также является решением (принцип суперпозиции);

¹Из курса аналитической механики известно, что в классической механике $p = \partial S/\partial x$, $H = -\partial S/\partial t$ (S — действие). Если в квантовой механике $p \Rightarrow -i\hbar\partial/\partial x = \hat{p}$, то следует ожидать по аналогии подобного соответствия и для энергии, $E \Rightarrow i\hbar\partial/\partial t \rightarrow \hat{H}$.

- уравнение Шредингера — уравнение первого порядка по времени, поэтому волновая функция в любой момент времени полностью определяется, если она известна в некоторый момент t_0 .

Далее всюду, кроме гл. 14, мы ограничиваемся случаем, когда гамильтониан \hat{H} не зависит от времени явно.

■ Особый интерес представляют **стационарные решения уравнения Шредингера**, т. е. решения, для которых плотность вероятности $|\psi_n(\mathbf{r}, t)|^2$ не меняется со временем. Вся зависимость такого решения от времени должна сводиться к некоторому фазовому множителю $\psi_n(\mathbf{r}, t) = \psi_n(\mathbf{r})e^{i\phi_n(t)}$. Подставим эту функцию в уравнение Шредингера (2.1). Разделение переменных превращает (2.1) в два уравнения, которые записать в виде

$$\phi_n(t) = -\frac{E_n t}{\hbar}, \quad \hat{H}\psi_n(\mathbf{r}) = E_n\psi_n(\mathbf{r}).$$

Величина E_n появляется как параметр разделения переменных, не зависящий от \mathbf{r} и t . Принцип соответствия делает естественным отождествление этой величины с энергией системы в состоянии ψ_n .

Второе из этих уравнений есть уравнение на собственные значения E_n для гамильтониана \hat{H} . Это

— **уравнение Шредингера для стационарных состояний:**

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi_n(\mathbf{r}) &\equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_n(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi_n(\mathbf{r}) = E_n\psi_n(\mathbf{r}), \\ \psi_n(\mathbf{r}, t) &= \psi_n(\mathbf{r})e^{-iE_n t/\hbar}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Как мы увидим ниже, физически осмысленные решения непрерывны вместе со своей первой производной. Они образуют базис *энергетического представления*.

Обычно решения нумеруют в порядке возрастания собственных значений $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq E_3 \leq \dots$. Состояние, отвечающее наименьшей энергии E_0 , называют *основным состоянием*.

◇ Если одно собственное значение E отвечает нескольким различным волновым функциям ψ_α , т. е. $\hat{H}\psi_\alpha = E\psi_\alpha$ при $\alpha = 1, \dots, k$, то говорят, что состояние с энергией E *вырождено* (k -кратно). Ясно, что любая линейная комбинация функций ψ_α также описывает стационарное состояние с энергией E . При описании системы с вырождением любой из наборов функций ψ_α можно рассматривать как базис. Во многих случаях вырождение связано с существованием какой-то симметрии системы, состояния ψ_α переходят друг в друга при преобразованиях этой симметрии.

■ **Нормировка волновой функции.** Начало отсчета потенциальной энергии обычно выбирают так, чтобы подчеркнуть исчезновение взаимодействия на больших расстояниях¹: $U(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. В соответствии с этим постановки соответствующих краевых задач и нормировки волновой функции существенно различаются для

¹ Это невозможно для гармонического осциллятора, бесконечно глубокой прямоугольной ямы... В таких задачах всегда имеют в виду, что рост потенциала останавливается при очень больших r , формально наше условие удовлетворяется после замены $U(r) \rightarrow U(r) - U(\infty)$.

случаев $E < 0$ и $E > 0$. Это различие соответствует двум разным типам классического движения.

◇ При $E < 0$ движение частицы *финитно* — она остается в конечной области пространства. В соответствующей квантовой задаче можно рассчитывать, что в ограниченной области пространства есть одна частица, т. е. можно потребовать выполнения условия нормировки в форме (1.11).

◇ При $E > 0$ движение частицы *инфинитно* — она уходит на бесконечность, где имеет энергию $E = p^2/(2m) > 0$. В соответствующей квантовой задаче также $E > 0$, в указанной области $\psi \sim C_1 e^{ipx/\hbar} + C_2 e^{-ipx/\hbar}$. При этом частица не локализуется в какой-нибудь конечной области пространства, условие нормировки (1.11) не может выполняться. Взамен этого используется естественное обобщение условия (1.11) — нормировка на поток $\langle p'|p \rangle = (m/|p|) \delta(p - p')$ (2.76).

2.1.2. Эволюция состояния со временем

В общем случае эволюция волновой функции определяется следующим образом. Разложим волновую функцию начального состояния $\psi(\mathbf{r}, 0)$ по собственным функциям $\psi_n(\mathbf{r})$ гамильтониана системы \hat{H} : $\psi(\mathbf{r}, 0) = \sum c_n \psi_n(\mathbf{r})$. Тогда со временем каждая из этих компонент эволюционирует по своему закону (2.2), и в итоге мы имеем

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &= \sum c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\mathbf{r}), \\ (c_n &= \int \psi_n^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, 0) d^3r). \end{aligned} \quad (2.3)$$

◆ Поскольку $\langle E \rangle = \int \psi^*(r, t) \hat{H} \psi(r, t) d^3r = \sum_n E_n |c_n|^2$, то c_n есть амплитуда вероятности обнаружить у системы энергию E_n . Набор величин c_n есть волновая функция системы в энергетическом представлении.

◇ Иногда закон эволюции (2.3) удобно записывать формально с помощью оператора эволюции $\hat{U}(t, 0)$, обсуждаемого в § 3.1. Если гамильтониан не зависит от времени явно, можно записать $\hat{U} = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$.

■ Нетрудно убедиться, что эволюцию волновой функции (2.3) можно описать и с помощью **функции Грина G** , которая в сущности представляет собой запись оператора эволюции в координатном представлении:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &= \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \psi(\mathbf{r}', 0) d^3r' : \\ G &= \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') e^{-iE_n t/\hbar}. \end{aligned} \quad (2.4a)$$

Функция Грина удовлетворяет уравнению с начальным условием

$$\begin{aligned} i\hbar \partial G / \partial t &= \hat{H} G, \\ G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0) &= \sum \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (2.4b)$$

2.1.3. Плотность тока вероятности

Рассмотрим плотность вероятности $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ и ее изменение со временем, $d\rho/dt = \psi^* d\psi/dt + (d\psi^*/dt) \psi$. Подставим сюда вместо производных от ψ и ψ^* их

выражения, получающиеся из уравнения Шредингера (2.1). В итоге найдем

$$\frac{d\rho}{dt} = \frac{i\hbar}{2m} Z, \quad Z = \psi^* \nabla^2 \psi - (\nabla^2 \psi^*) \psi.$$

Добавляя и вычитая в Z выражение $\nabla \psi^* \nabla \psi$, запишем эту величину в виде $Z = \psi^* \nabla^2 \psi + \nabla \psi^* \nabla \psi - \nabla \psi^* \nabla \psi - (\nabla^2 \psi^*) \psi = \nabla [[\psi^* (\nabla \psi) - (\nabla \psi^*) \psi]]$. Итак, правая часть уравнения для $d\rho/dt$ оказалась дивергенцией некоторого вектора, и это уравнение можно переписать в виде уравнения непрерывности:

$$d\rho/dt = -\nabla \mathbf{j}; \quad \mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^* (\nabla \psi) - (\nabla \psi^*) \psi]. \quad (2.5)$$

Выделяя амплитуду и фазу волновой функции, имеем

$$\psi = \sqrt{\rho} e^{i\varphi} \Rightarrow \mathbf{j} = \hbar \rho \nabla \varphi / m. \quad (2.6)$$

Существование уравнения (2.5) показывает, что наша интерпретация квадрата модуля волновой функции как плотности вероятности является внутренне согласованной и последовательной. Вектор \mathbf{j} называют *вектором плотности тока вероятности*. В соответствии с (2.6) этот вектор направлен вдоль градиента фазы волновой функции. Именно в этом находят физический смысл фазы.

◇ В частности, для плоской волны (1.1)

$$\psi(\mathbf{x}) = A e^{i(\mathbf{p}\mathbf{x} - Et)/\hbar} \Rightarrow \mathbf{j} = |A|^2 \frac{\mathbf{p}}{m} \equiv |A|^2 \mathbf{v} \quad (2.7a)$$

(\mathbf{v} — скорость частицы). Поэтому далее мы (если это не оговорено специально) будем считать стандартным выражение для плоской волны, нормированной на поток (одна частица в секунду через площадку единичной площади, перпендикулярную вектору \mathbf{p}):

$$\psi(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{m}{p}} e^{i(\mathbf{p}\mathbf{x} - Et)/\hbar}. \quad (2.7b)$$

2.1.4. Теорема о вириале

Пусть $|n\rangle$ — стационарное состояние дискретного спектра, удовлетворяющее уравнению $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$. Тогда для любого оператора \hat{A} имеем

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

В частности, для $\hat{A} = \hat{\mathbf{p}} \hat{\mathbf{r}}$ с учетом (17.26) и соотношений $\hat{H} = T + U(r)$, $T = \hat{p}^2/2m$ получаем

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

Последнее из этих соотношений составляет **теорему о вириале**:

$$2\langle n | T | n \rangle = \langle n | \mathbf{r} \nabla U | n \rangle. \quad (2.8)$$

2.2. Сохраняющиеся величины. Симметрия и вырождение стационарных состояний 41

◇ В частности, для гармонического осциллятора имеем

$$\langle n | \frac{m\omega^2 x^2}{2} | n \rangle = \langle n | \frac{\hat{p}^2}{2m} | n \rangle, \quad \langle T \rangle = \langle U \rangle = \frac{E_n}{2}.$$

◇ Точно так же для атома водорода

$$\langle n | \frac{e^2}{r} | n \rangle = 2 \langle n | \frac{\hat{p}^2}{2m} | n \rangle, \quad \langle T \rangle = -\langle U \rangle / 2 = -E_n.$$

§ 2.2. Сохраняющиеся величины. Симметрия и вырождение стационарных состояний

Рассмотрим оператор какой-нибудь физической величины A , и вычислим производную по времени от ее среднего значения по некоторому состоянию $|\psi\rangle$:

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} \equiv \frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \left\langle \frac{d\psi}{dt} | \hat{A} | \psi \right\rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} | \frac{d\psi}{dt} \rangle.$$

Используя для $d\psi/dt$ уравнение Шредингера (2.1), получим

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \langle \psi | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} - \left(\frac{\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}}{i\hbar} \right) | \psi \rangle.$$

Отсюда следует, что если оператор \hat{A} а) коммутирует с гамильтонианом и б) не зависит от времени явно, т. е. $\partial \hat{A} / \partial t = 0$, то среднее значение $\langle A \rangle$ не меняется со временем, физическая величина A *сохраняется*.

$\underbrace{\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0, \quad [\hat{A}, \hat{H}] = 0}_{\downarrow}$	(2.9)
$\hat{A} \text{ — оператор сохраняющейся величины.}$	

В этом случае величина A и энергия одновременно измеримы, т. е. в частности стационарные состояния можно выбрать так, чтобы они одновременно были собственными состояниями и оператора \hat{A} и гамильтониана¹.

В частности, для свободного движения $\hat{H} = \hat{p}^2 / (2m)$, поэтому $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$, и состояния с определенным импульсом стационарны.

■ **Симметрия и законы сохранения.** Пусть имеется некоторая группа преобразований S . Преобразования этой группы описываются набором унитарных операторов \hat{S}_i , преобразующих вектор состояния $|\psi\rangle$ в вектор состояния $\hat{S}_i |\psi\rangle$. Мы рассматриваем конечные группы, в которых весь набор операторов \hat{S}_i может быть построен из конечного набора унитарных операторов \hat{U} — *генераторов группы*.

¹Мы имеем в виду, что \hat{A} не сводится к какой-нибудь функции гамильтониана. Случай, когда такое сведение возможно, например, $\hat{A} = e^{-\beta \hat{H}}$ представляется тривиальным. В этом случае в стационарном состоянии с энергией E мы имеем $\langle A \rangle = e^{-\beta E}$, и никаких новых свойств у системы нет.

В частности, под действием оператора \hat{U} вектор состояния $|\psi\rangle$ преобразуется в вектор состояния $\hat{U}|\psi\rangle$. Применение того же преобразования симметрии к бра-вектору $\langle\psi|$ описывается оператором \hat{U}^{-1} . Утверждение, что система обладает симметрией S означает, что преобразование симметрии для векторов состояния \hat{U} не меняет *наблюдаемые* свойства системы, т. е. в частности И энергию системы (среднее значение гамильтониана), $\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U}|\psi\rangle$. Поскольку это соотношение имеет место для любого вектора состояния, из него следует, что существование нашей симметрии влечет за собой равенство

$$\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U} = \hat{H} \Rightarrow [\hat{H}, \hat{U}] = 0. \quad (2.10)$$

Таким образом, если в системе существует некоторая симметрия, то оператор преобразований этой симметрии коммутирует с гамильтонианом, т. е. в силу (2.9) определяет некоторую сохраняющуюся величину. Это утверждение составляет содержание *теоремы Нетер*:

Если система обладает некоторой симметрией, то существуют сохраняющиеся операторы, отвечающие этой симметрии. (2.11a)

Справедливо и обратное утверждение:

Если в рассматриваемой системе сохраняется какая-то величина помимо функций от энергии, то система обладает некоторой симметрией (быть может, скрытой). (2.11б)

Принято различать *непрерывные* и *дискретные* симметрии. Примером *дискретной* симметрии является инвариантность по отношению к отражению координат. При этом сохраняющейся величиной является чисто квантовая величина, *четность*, § 2.3. Примерами *непрерывных* симметрий являются хорошо известные вам инвариантности по отношению к сдвигу (*трансляционная инвариантность*) и к поворотам (*инвариантность по отношению к вращениям*). В этих случаях существуют семейства преобразований \hat{U} , чьи операторы коммутируют с гамильтонианом (например, операторы сдвигов на разные расстояния), и все эти операторы можно получить многократным повторением «элементарного», *инфинитезимального* (бесконечно малого) преобразования. При этом, например, импульс определяется как аддитивная величина, сохраняющаяся в силу трансляционной инвариантности, именно такой способ использовался в § 1.7. В таблице 2.2 перечислены многие такие соответствия. Для полноты сюда включены и релятивистские

Таблица 2.1. Соотношение: инвариантность свойств системы по отношению к некоторым преобразованиям — законы сохранения отдельных физических величин

Инвариантность по отношению к		Сохраняющаяся величина
сдвигу координат	\Rightarrow	импульс \mathbf{p}
сдвигу по времени	\Rightarrow	энергия E
вращениям	\Rightarrow	момент импульса \mathbf{L}
отражению координат	\Rightarrow	четность P
отражению времени	\Rightarrow	временная четность T
частица \leftrightarrow античастица (зарядовое сопряжение)	\Rightarrow	зарядовая четность C

являются хорошо известные вам инвариантности по отношению к сдвигу (*трансляционная инвариантность*) и к поворотам (*инвариантность по отношению к вращениям*). В этих случаях существуют семейства преобразований \hat{U} , чьи операторы коммутируют с гамильтонианом (например, операторы сдвигов на разные расстояния), и все эти операторы можно получить многократным повторением «элементарного», *инфинитезимального* (бесконечно малого) преобразования. При этом, например, импульс определяется как аддитивная величина, сохраняющаяся в силу трансляционной инвариантности, именно такой способ использовался в § 1.7. В таблице 2.2 перечислены многие такие соответствия. Для полноты сюда включены и релятивистские

законы сохранения, обсуждаемые в приложении В. В нижней части таблицы перечислены и дискретные законы сохранения, из которых в основной части курса мы обсуждаем только сохранение четности и – кратко – сохранение временной четности.

■ Пусть операторы \hat{A} и \hat{B} коммутируют с гамильтонианом, но не коммутируют друг с другом. Подействовав операторами $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ и $[\hat{B}, \hat{H}] = 0$ на собственное состояние гамильтониана $|E\rangle$, мы видим, что векторы $\hat{A}|E\rangle$ и $\hat{B}|E\rangle$ также являются собственными векторами гамильтониана. Эти векторы не могут совпадать в силу некоммутативности операторов \hat{A} и \hat{B} (один из них может совпадать с $|E\rangle$). Таким образом, одному и тому же значению энергии отвечают по крайней мере два разных собственных вектора, т. е. в этом случае стационарные состояния обязательно вырождены.

$$\text{Если } \begin{cases} [\hat{A}, \hat{H}] = 0, \\ [\hat{B}, \hat{H}] = 0, \\ [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{array}{l} \text{стационарные} \\ \text{состояния} \\ \text{вырождены.} \end{array} \quad (2.12a)$$

Почти всегда справедливо и обратное утверждение:

$$\text{Если состояния системы вырождены, то существует не менее двух разных операторов, коммутирующих с гамильтонианом и не коммутирующих друг с другом.} \quad (2.12b)$$

Сохранение какой-нибудь величины A связано обычно с существованием некоторой симметрии. Из (2.12) следует, что наличие нескольких одновременных симметрий в системе приводит к вырождению стационарных состояний.

Система тождественных квантовых частиц обладает симметрией по отношению к перестановке этих частиц, не указываемой явно в виде гамильтониана. Эта симметрия приводит к выводам о возможных состояниях такой системы § 12.1.

§ 2.3. Симметрия по отношению к отражениям и обращению времени

Четность. Действие оператора отражения координат \hat{P} на любую функцию координат состоит в изменении знаков этих координат в аргументе:

$$\hat{P}\psi(\mathbf{x}) = \psi(-\mathbf{x}). \quad (2.13)$$

Подчеркнем, что здесь обсуждается отражение координат относительно некоторого центра, т. е. рассматриваемая операция нарушает трансляционную инвариантность.

Найдем возможные собственные значения оператора отражения P , т. е. решения уравнения $\hat{P}\psi(x) = P\psi(x)$. Так как $\hat{P}\psi(x) = \psi(-x)$, то повторное действие этого оператора снова даёт $\hat{P}^2\psi(x) = \psi(x)$. В то же время $\hat{P}^2\psi(x) = P^2\psi(x)$, т. е. $P^2 = 1$. Про состояния с определенным значением P говорят, что они обладают определенной **четностью**.

Четность квантовомеханической системы может принимать значения $P = +1$ (четное состояние) или $P = -1$ (нечетное состояние).

Если $\hat{P}\hat{A} = \hat{A}$, то величины \hat{P} и \hat{A} коммутируют, и одновременно измеримы. В частности, если $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ (т. е. $\hat{P}\hat{H} = \hat{H}$), то четность сохраняется. При этом можно так определить стационарные состояния, чтобы они имели определенную четность. В частности, для фотона и π -мезона четность есть -1 .

Четность — специфически квантовое понятие. Она не имеет классического аналога, поскольку определяется для ненаблюдаемой волновой функции, а для классической величины — вероятности — четные и нечетные состояния неразличимы. Явное выражение оператора отражения координат через операторы координаты и импульса выписано ниже (4.17).

Для частиц со спином $1/2$ (см. ниже § 9) понятие четности определить нельзя. Однако, для них определяется понятие *внутренней четности* одной частицы по отношению к другой. Значение этой величины постулируется. Если такие частицы получаются во взаимодействиях, сохраняющих четность (электромагнитных или ядерных), то их внутренние четности определяются с помощью закона сохранения четности. Для протона, нейтрона и электрона принимают, что внутренняя четность есть $+1$, тогда для античастиц — антипротона, антинейтрона и позитрона внутренние четности равны по -1 .

Временная четность. Пусть уравнение Шредингера 2.1 имеет некоторое решение $\psi(\mathbf{r}, t)$. В силу эрмитовости Гамильтониана это означает, что волновая функция $\psi^*(\mathbf{r}, t)$ является решением того же уравнения Шредингера, описывающим "эволюцию" системы в прошлое (*при отражении времени*). Это свойство описывает сохранение *временной четности* в квантовой механике.

§ 2.4. Одномерные задачи

Многие проблемы рассматриваются далее на примере задач одномерного движения. Мы рассматриваем два разных вида таких задач.

◇ *Задачи на бесконечной прямой* отвечают обычному одномерному движению (в длинных молекулах, волноводах и т. п.)

◇ *Задачи на полубесконечной прямой* возникают при описании радиального движения в центрально-симметричном поле (см. ниже). В такой задаче отрицательные значения r не имеют смысла, и в предыдущую задачу вводится потенциал, обращаящийся в ∞ при $r < 0$. Соответственно, граничные условия для этой задачи включают требование $\psi(x = 0) = 0$.

■ Свойства решений

Уравнение Шредингера (2.2) — линейное дифференциальное уравнение второго порядка — имеет 2 независимых решения. Для любой пары решений такого уравнения вводят определитель Вронского — *вронскиан*

$$W = \psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_1'(x)\psi_2(x).$$

Нетрудно проверить, что в силу уравнения Шредингера вронскиан не зависит от

координат, $dW/dx = 0$, т. е.

$$W = \psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_1'(x)\psi_2(x) = \text{const},$$

для пары линейно независимых решений $W \neq 0$.

(2.14)

◆ В физически интересных случаях производная $\psi'(x)$ непрерывна. Действительно, интегрируя уравнение Шредингера (2.2) в малой окрестности произвольной точки $x = a$, получаем

$$\int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} \psi''(x) dx = \psi'(a+\epsilon) - \psi'(a-\epsilon) = (2m/\hbar^2) \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx [U(x) - E] \psi(x) \rightarrow 0.$$

Иными словами, если $U(x)$ не обращается в бесконечность, то из конечности волновой функции следует непрерывность ее производной и непрерывность самой функции, т. е. при $\epsilon \rightarrow 0$

$$\psi(a+\epsilon) - \psi(a-\epsilon) \rightarrow 0; \quad \psi'(a+\epsilon) - \psi'(a-\epsilon) \rightarrow 0. \quad (2.15)$$

◇ В частности, пусть при $x = a$ потенциал $U(x)$ имеет скачок так, что уравнение Шредингера имеет вид

$$\psi''(x) = \begin{cases} -k^2\psi(x) & \text{при } x < a & \left(k^2 = \frac{2m[E - U(a-\epsilon)]}{\hbar^2}\right), \\ \varkappa^2\psi(x) & \text{при } x > a & \left(\varkappa^2 = \frac{2m[U(a+\epsilon) - E]}{\hbar^2}\right). \end{cases}$$

Тогда вблизи этой точки решение можно представить в виде

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin [k(x-a)] + B \cos [k(x-a)] & \text{при } x < a, \\ C \operatorname{sh} [\varkappa(x-a)] + D \operatorname{ch} [\varkappa(x-a)] & \text{при } x > a. \end{cases}$$

Из условий непрерывности (2.15) получается $D = B$, $C = Ak/\varkappa$, т. е. **правила сшивки** при переходе через точку a (не меняющие вронскиан (2.14)):

$$\begin{aligned} A \sin [k(x-a)] &\rightarrow A \frac{k}{\varkappa} \operatorname{sh} [\varkappa(x-a)], \\ B \cos [k(x-a)] &\rightarrow B \operatorname{ch} [\varkappa(x-a)]. \end{aligned} \quad (2.16)$$

◇ При описании некоторых явлений разумное приближение дают модельные потенциалы с бесконечными скачками в $U(x)$ (пример — бесконечно глубокий потенциальный ящик). При этом второе из условий (2.15) может нарушиться.

В частности, из уравнения Шредингера (2.2) с потенциалом $U(x) = -G\delta(x-a)$ получается

$$\psi'(a+\epsilon) - \psi'(a-\epsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx [-G\delta(x-a) - E] \psi(x).$$

Отсюда следует

$$\psi'(a+0) - \psi'(a-0) = -k_0\psi(a) \quad \left(k_0 = \frac{2mG}{\hbar^2}\right). \quad (2.17)$$

Следует не путать условия шивки (2.15)–(2.17) с граничными условиями, которые обсуждаются ниже.

Колоссальное многообразие ситуаций для задач о спектре состояний и их свойствах, о прохождении волн и волновых пакетов и их эволюции со временем, возникающих при варьировании формы потенциала, удобно изучать с помощью компьютерного моделирования (пакет программ QUANT, реализованный в компьютерном практикуме НГУ, см. приложение А и [8]).

2.4.1. Дискретный спектр

■ Постановка задачи. Общие свойства решений

Как уже обсуждалось, при $E < 0$ выполнимо условие нормировки в форме (1.11). Сходимость интеграла (1.11) означает, что $\psi(x)$ достаточно быстро спадает при $|x| \rightarrow \infty$. Во всяком случае,

$$\psi(x) \rightarrow 0 \text{ при } |x| \rightarrow \infty. \quad (2.18)$$

Это **граничное условие** для $\psi(x)$ вместе с требованием непрерывности может удовлетворяться только для некоторых значений E . (Наглядные примеры разбираются в терминальном классе.) Это и есть собственные значения гамильтониана E_n — возникает **дискретный спектр**.

Перечислим некоторые общие свойства решений одномерной задачи.

- *Дискретные уровни невырождены.*

Действительно, пусть $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ — две разные собственные функции \hat{H} , отвечающие одному значению E . В силу граничного условия (2.18) и свойства вронскианов (2.14) эти решения не могут быть линейно независимыми, т. е. они совпадают (с точностью до нормировки).

- Можно выбрать фазы собственных функций задачи так, чтобы все они были действительными.

- Можно показать, что *волновая функция $\psi_n(x)$, отвечающая $n + 1$ -му по величине собственному значению E_n , обращается в ноль n раз при конечных x* (примеры — потенциальный ящик, осциллятор). *Между двумя любыми нулями $n + 1$ -го состояния лежит ровно один ноль n -го состояния* (осцилляционная теорема).

В соответствии с этой теоремой, волновая функция основного состояния не меняет знака на всей оси x . Ортогональность состояний, отвечающих разным значениям энергии, обеспечивается знакопеременностью волновых функций. Качественно это можно понять так, что кинетическая энергия тем меньше, чем меньше производная $d\psi/dx$, т. е. чем «глаже» волновая функция.

- *При преобразовании $U(x) \rightarrow k^2 U(x/k)$ энергия состояния меняется как $E \rightarrow k^2 E$* (закон подобия).

Подчеркнем, что для двумерной и трехмерной задач подобные свойства либо не обязательно выполняются, либо вообще не формулируются.

2.4.2. Прямоугольная потенциальная яма

Рассмотрим важный пример — уровни энергии (связанные состояния, $E < 0$) в прямоугольной потенциальной яме на бесконечной прямой:

$$U(x) = \begin{cases} -V & \text{при } |x| < a, \\ 0 & \text{при } |x| > a, \end{cases} \quad k_0 \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{2mV}{\hbar^2}}. \quad (2.19)$$

Уравнение Шредингера имеет вид

$$\begin{cases} \psi'' + k_1^2 \psi = 0; & (k_1^2 = 2m(V - |E|)/\hbar^2) & \text{при } |x| < a, \\ \psi'' - \kappa^2 \psi = 0; & (\kappa^2 = 2m|E|/\hbar^2) & \text{при } |x| > a. \end{cases}$$

◇ Пусть сначала энергия E произвольна. Решим второе из наших уравнений при $x < -a$. Решение представляет собой суперпозицию растущей и падающей при $x \rightarrow -\infty$ экспонент, $\psi(x < -a) = C_1 e^{\kappa x} + C_2 e^{-\kappa x}$. В силу (2.18) коэффициент при растущей экспоненте равен нулю, $C_2 = 0$. Внутри ямы, при $-a < x < a$ решение имеет вид

$$\psi = B_1 \cos k_1 x + B_2 \sin k_1 x.$$

Коэффициенты B_1 и B_2 выражаются через C_1 с помощью правил сшивки (2.16) в точке $x = -a$. В области $x > a$ решение опять представляет собой суперпозицию экспонент, $\psi(x > a) = C_3 e^{\kappa x} + C_4 e^{-\kappa x}$. Коэффициенты C_3 и C_4 выражаются через B_1 и B_2 (а следовательно и через C_1) с помощью правил сшивки (2.16) в точке $x = a$. Коэффициент C_3 при растущей экспоненте оказывается отличным от нуля, получающаяся волновая функция не удовлетворяет граничному условию (2.19) (не нормируема). Граничному условию удовлетворяют только те решения, для которых $C_3 = 0$. Условие $C_3 = 0$ и представляет собой уравнение на собственные значения E , оно и определяет (дискретные) собственные значения гамильтониана.

В рассматриваемой задаче можно упростить выкладки, воспользовавшись ее симметрией, $\hat{H}(-x) = \hat{H}(x)$, которая проявляется при выборе начала координат в центре ямы. При таком выборе четность (см. § 2.3) сохраняется, и полное рассмотрение сводится к раздельному рассмотрению отдельно четных и нечетных решений.

◇ Четные решения имеют вид

$$\psi(x) = \begin{cases} A \cos k_1 x & \text{при } |x| < a, \\ B e^{\kappa(a-|x|)} & \text{при } |x| > a. \end{cases}$$

Записав теперь условия непрерывности для $\psi'(x)$ и $\psi(x)$ в точке $x = a$ и поделив одно из получившихся равенств на другое, получаем уравнение для определения энергии уровня (как уравнение для определения k)

$$\operatorname{tg} k_1 a = \frac{\kappa}{k_1} = \sqrt{\frac{(k_0 a)^2}{(k_1 a)^2} - 1}. \quad (2.20a)$$

Изобразим на графике в зависимости от параметра $k_1 a$ обе части уравнения, $\operatorname{tg} k_1 a$ и $\sqrt{(k_0 a/k_1 a)^2 - 1}$. Точки пересечения определяют набор решений k_n (или E_n), т. е.

энергия квантуется. Число решений зависит только от параметра k_0a . Легко видеть, что это уравнение имеет решение при сколь угодно малом значении k_0a .

◇ *Нечетные решения* имеют вид

$$\psi(x) = \begin{cases} A \sin k_1 x & \text{при } |x| < a, \\ B e^{-\kappa(x-a)} & \text{при } x > a, \\ -B e^{\kappa(x+a)} & \text{при } x < -a. \end{cases}$$

Тем же путем, как и для четных решений, в этом случае получается уравнение на собственные значения

$$\operatorname{tg} k_1 a = -k_1 / \kappa. \quad (2.20б)$$

(Это уравнение имеет решения только при $k_0a > \pi/2$.)

Как и в предыдущем случае удобно заменить отношение k_1/κ на $k_1a/\kappa a$. При этом наше уравнение приобретает вид соотношения для величины k_1a , куда параметры потенциала входят в виде единственной комбинации k_0a . В таком виде это уравнение допускают простое графическое решение (пересечение графиков величины $\operatorname{tg} k_1 a$ и объекта в правой части (2.20б)). Таким образом, *единственным характерным параметром задачи, определяющим структуру уровней, является величина k_0a , т. е. Va^2 .*

Остальные свойства решений получите, решая задачу 2.9.

• **Случай $E = 0$.** Заслуживает внимания случай нулевой энергии для такого потенциала, который в некоторых областях обращается в нуль. В этих областях уравнение Шредингера принимает вид $-(\hbar^2/2m)\psi'' = 0$, и его решение имеет вид линейной функции координаты, $\psi = Ax + B$. При $E = 0$ требование нормируемости волновой функции $|\psi(x)|^2 dx = 1$ исчезает, т. к. решение находится на границе непрерывного спектра, где при $E = 0$ волновая функция Ce^{ikx} обращается в константу ($A = 0$). Именно такой вид имеет волновая функция снаружи области потенциала. Если параметры потенциала таковы, что решение с $E = 0$ существует, то это значит, что при этих значениях параметров имеет место «выталкивание уровня» (уровень исчезает при соответствующем небольшом изменении параметров потенциала).

Этот прием особенно полезен, если потенциал можно описать несколькими ямами, с областями $V = 0$ между ними. Мы же в качестве примера рассмотрим прямоугольную потенциальную яму (2.19), где внутри ямы волновая функция имеет вид $C \cos(k_0x + \phi)$, а условия сшивки (2.15) сводятся к условию непрерывности производных на краях ямы, $\sin(\pm k_0a + \phi) = 0$. Эти условия имеют решения только при $2k_0a = n\pi$ (внутри ямы укладывается целое число полуволн с $k = k_0$), а $\phi = 0$ при четном n и $\phi = \pi/2$ при нечетном n . Обратите внимание, что для обоих решений вне ямы волновая функция есть константа B_ℓ (слева) или B_r (справа), причем при четном n с обеих сторон от ямы эти константы одинаковы, $B_\ell = B_r = \pm C$, а при нечетном n — противоположны по знаку, $B_\ell = -B_r = \pm C$. В частности, выясним, при какой глубине прямоугольной ямы заданного размера в ней появляется первый нечетный уровень. При искомой глубине энергия уровня равна нулю, и минимальное значение величины $k_0a = \pi/2$, т. е. в полном соответствии с (2.20б)

$$V \geq \frac{1}{2m} \left(\frac{\pi \hbar}{2a} \right)^2. \quad (2.21)$$

2.4.3. Мелкая яма, δ -яма

Важный пример, результаты исследования которого удобны для многих приложений, доставляет *мелкая яма* — ситуация, когда потенциал $V(x) \leq 0$ всюду, и его среднее значение по области, где он отличается от нуля $|x| < a$, мало по сравнению с характерной кинетической энергией локализации в этой области $\hbar^2/(2ma^2)$. По-другому, это потенциал с характерной величиной V_0 и размером a , быстро убывающий при $|x| \gg a$, если для него $V_0 \ll \hbar^2/(2ma^2)$. (Частным примером такой задачи является прямоугольная яма, исследованная выше при $k_0a \ll 1$.) В такой задаче, как мы увидим, существует единственное связанное состояние — основное, и энергия основного состояния $-E$ по величине значительно меньше V_0 так, что радиус убывания соответствующей волновой функции $1/\varkappa = \sqrt{\hbar^2/(2mE)} \gg a$.

Рассмотрим волновую функцию в точках $x = \pm x_1$, выбранных так, что $x_1 \gg a$ и в то же время $x_1 \ll 1/\varkappa$. В этих точках можно считать $V(\pm x_1) = 0$. В то же время поскольку масштаб изменения волновой функции с координатой определяется величиной $1/\varkappa \gg x_1$, можно считать в хорошем приближении $\psi(x_1) = \psi(-x_1)$. Чтобы получить соотношения для производной волновой функции, запишем уравнение Шредингера $\psi''(x) = (2mV(x)/\hbar^2)\psi - (2mE/\hbar^2)\psi$ и проинтегрируем его от $-x_1$ до x_1 . При этом получается

$$\psi'(x_1) - \psi'(-x_1) = \int_{-x_1}^{x_1} [(2mV(x)/\hbar^2) - (2mE/\hbar^2)] \psi(x) dx.$$

При вычислении интеграла в правой части изменением ψ можно пренебречь, т. е. считать что всюду внутри интервала интегрирования например $\psi(x) = \psi(x_1)$. Помимо этого, как мы говорили $|E| \ll V_0$. Поэтому можно пренебречь и вторым членом в квадратных скобках. В итоге соотношение между производными приобретает вид

$$\begin{aligned} \psi'(x_1) - \psi'(-x_1) &= -k_0\psi(x_1), \quad \text{где} \\ k_0 &= -(2m/\hbar^2) \int_{-x_1}^{x_1} V(x) dx \rightarrow (2m/\hbar^2) \int_{-\infty}^{\infty} V(x) dx. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Предельный переход обеспечивается тем, что потенциал достаточно быстро убывает при $|x| \gg a$. Можно использовать эти соотношения как условия сшивки, подобные условиям сшивки на δ -яме (2.17), см. обсуждение на стр. 45. При этом

$G = \int_{-\infty}^{\infty} V(x) dx$ и легко получается

$$\varkappa = k_0/2 \Rightarrow E = -\frac{\hbar^2 k_0^2}{8m}, \quad \psi = \sqrt{k_0/2} e^{-k_0|x|/2} \quad \forall |x| \gg a. \quad (2.23)$$

Ясно, что замена масштаба координат с сохранением параметра k_0 мало что изменит в решении. В частности, изменение масштаба с $a \rightarrow 0$ прямо приведет наши соотношения к виду условий сшивки на δ -яме (2.17) и полученные решения полностью описывают связанное состояние в δ -яме (заметим еще, что $k_0 \sim (2m/\hbar^2)|V_0|a$). Таким образом, связанное состояние существует в сколь угодно мелкой или сколь угодно узкой потенциальной яме при единственном условии положительности интеграла (2.22).

Полученное значение энергии уровня значительно меньше V_0 , что оправдывает отбрасывание слагаемого $(2mE/\hbar^2)x_1$ по сравнению с k_0 в предыдущей выкладке. Помимо этого, полезно заметить, что разброс координат в этом случае $\Delta x = 1/k_0$ значительно больше a , т. е. частица большую часть времени проводит вне ямы — в полном соответствии с соотношением неопределенностей.

• Подчеркнем, что вывод о существовании хотя бы одного уровня в мелкой яме справедлив только в одномерном случае. В **трехмерном случае** это заведомо не так. В частности радиальная прямоугольная яма $V(r) = -V$ при $r < a$, $V(r) = 0$ при $r > a$ описывается радиальным уравнением Шредингера с $V(r) = \infty$ при $r < 0$ (отрицательных значений r не бывает). Решение описывается волновыми функциями задачи (2.19), которые обращаются в нуль при $r = 0$ (нечетные состояния задачи (2.19)). Условие появления такого уровня имеет вид (2.21). В **двумерном случае** уровень существует «почти всегда» (см. подробнее [1]).

2.4.4. Непрерывный спектр. Задача рассеяния

■ **Постановка задачи.** Как уже говорилось, при $E > 0$ частица не локализуется в конечной области пространства, условие нормировки (1.11) не может выполняться. В этом случае допустимо любое положительное значение энергии **непрерывный спектр**. Здесь естественно возникает

одномерная задача рассеяния.

Слева направо падает поток частиц $N e^{ikx}$. Из-за взаимодействия с рассеивателем возникает рассеянная волна $iN f(k, k') e^{ik'x}$, состоящая из отраженной волны, с $k' = -k$ при $x \rightarrow -\infty$, и прошедшей волны с $k' = k$ при $x \rightarrow \infty$. Требуется определить **амплитуду рассеяния** $f(k, k')$. Иначе говоря, граничное условие для уравнения Шредингера выбирается в виде

$$\psi \rightarrow N \begin{cases} (e^{ikx} + i f(k, -k) e^{-ikx}) & \forall x \rightarrow -\infty, \\ (e^{ikx} + i f(k, k) e^{ikx}) & \forall x \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (2.24)$$

и требуется найти **амплитуду рассеяния** $f(k, k')$.

Мы выбираем $N = \sqrt{m/(\hbar k)}$, что отвечает нормировке на поток. Обозначения для амплитуды рассеяния выбраны по аналогии со стандартными обозначениями трехмерной задачи, гл. 15. В частности, $iN f(k, -k) e^{-ikx}$ и $iN f(k, k) e^{ikx}$ вместе представляют собой волны, расходящиеся от рассеивателя, а $\sigma = |f(k, k)|^2 + |f(k, -k)|^2$ — величину полного потока, идущего от рассеивателя. В трехмерной задаче подобную величину называют **полным сечением рассеяния**.

(Нередко используют единое обозначение для амплитуды прошедшей волны, например, $B \equiv 1 + i f(k, k)$ и соответственно $A \equiv i f(k, -k)$. При этом $|B|^2$ — коэффициент прохождения, $|A|^2 \equiv |f(k, -k)|^2$ — коэффициент отражения.)

■ Оптическая теорема в одномерном случае

В процессе рассеяния вероятность сохраняется, т. е. сумма прошедшего и рассеянного потоков частиц совпадает с первоначальным потоком. Это равенство со-

ставляет содержание **оптической теоремы**

$$|1 + if(k, k)|^2 + |f(k, -k)|^2 = 1 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \boxed{2Im f(k, k) = \sigma \equiv \sum_{k'=\pm k} |f(k, k')|^2.} \quad (2.25)$$

В трехмерном случае соответствующее соотношение (15.12) получается менее тривиальным образом.

■ Рассмотрим сначала **нефизический случай**, когда потенциал не обращается в ноль при $x \rightarrow \infty+$ («ступенька»):

$$U(x) \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{при } x \rightarrow -\infty, \\ -V & \text{при } x \rightarrow \infty, \end{cases} \quad k_0 = \sqrt{\frac{2mV}{\hbar^2}}.$$

Тогда нормировки потоков слева и справа от ступеньки различны, и взамен (2.24) уравнение Шредингера следует решать с граничными условиями:

$$\psi \rightarrow e^{-iEt/\hbar} \begin{cases} N (e^{ikx} + if(k, -k)e^{-ikx}) & \forall x \rightarrow -\infty, \\ N_1 (e^{ik_1x} + if(k, k_1)e^{ik_1x}) & \forall x \rightarrow \infty, \end{cases}$$

$$k = \sqrt{2mE/\hbar^2}, \quad k_1 = \sqrt{k^2 + k_0^2}; \quad N = \sqrt{m/(\hbar k)}, \quad N_1 = \sqrt{m/(\hbar k_1)}.$$

Решение уравнение Шредингера дает амплитуду рассеяния

$$f(k, -k) = i \frac{k_1 - k}{k_1 + k}, \quad f(k, k_1) = i \frac{(\sqrt{k_1} - \sqrt{k})^2}{k_1 + k}.$$

Нетрудно убедиться, что коэффициенты прохождения $T = |1 + if(k, k)|^2$ и отражения $R = |f(k, -k)|^2$ связаны законом сохранения потока числа частиц $R + T = 1$. *Оптический аналог — отражение света при нормальном падении на границу раздела вакуум (справа) — стекло, в оптике волновой вектор выражается через показатель преломления n как $k = 2\pi/\lambda = \omega n/c$.*

◇ При $0 > E > -V$ область $x \rightarrow -\infty$ классически недостижима, и в этой области $\psi \rightarrow (B/\sqrt{\kappa})e^{\kappa x}$, $\kappa^2 = 2m(V - E)/\hbar^2$. *Оптический аналог — полное внутреннее отражение при движении из $+\infty$.*

□ Если потенциальная энергия обращается в ноль при $x \rightarrow \pm\infty$ (не слишком медленно), асимптотическое поведение волновой функции на больших расстояниях дается граничными условиями (2.24).

• Для **прямоугольной потенциальной ямы** (2.19) простые вычисления (две сшивки) дают в использованных выше обозначениях (задача 2.18)

$$1 + if(k, k) = \frac{e^{-2ika}}{\cos 2k_1 a - i \frac{k^2 + k_1^2}{2kk_1} \sin 2k_1 a} \equiv$$

$$\equiv - \frac{e^{-2ika}}{\cos^2(k_1 a) [tg(k_1 a) + ik/k_1] [tg(k_1 a) + ik_1/k]} \quad (2.26)$$

Вторая форма этого выражения показывает, что коэффициент прохождения обращается в бесконечность при отрицательных значениях энергии, отвечающих положениям уровней (2.20), когда следует заменить $k \rightarrow i\kappa$. Детальный анализ показывает, что такое соответствие между полюсами амплитуды рассеяния в комплексной плоскости энергии и значениями энергий уровней в этом же поле справедливо при любой форме потенциала.

Особо следует рассмотреть случай, когда в (2.19) $V < 0$ и $E < -V$ (*потенциальный барьер*). При этом величина k_1 становится чисто мнимой $k_1 = i\kappa$ и в соответствии с (2.26) при $\kappa a \gg 1$ коэффициент прохождения через барьер

$$D = |1 + if(k, k)|^2 \approx e^{-2\kappa(2a)}. \quad (2.27)$$

Мы специально выделили в показателе экспоненты полную ширину ямы $2a$.

2.4.5. Нестабильные частицы. Квазистационарные состояния

Возбужденные состояния квантовых систем нестационарны, они распадаются (излучение ядер, атомов, молекул, радиоактивный распад ядер и т. д.). Нередко эти состояния лишь слабо отличаются от обычных стационарных состояний (наподобие колебательного контура или механического осциллятора с малым затуханием, движение которых лишь слабо отличается от чисто периодического). Такие состояния называют *квазистационарными состояниями* — квазиуровнями, или — при описании элементарных частиц — *нестабильными частицами*. Вероятность перехода из возбужденного состояния с энергией E_n за единицу времени для каждого атома или ядра не зависит от общего числа атомов или ядер в системе, т. е. (закон распада)

$$dN(t) = -\gamma N(t)dt \Rightarrow N(t) = N(0)e^{-\gamma t}.$$

При этом зависимость волновой функции от времени выглядит как $e^{-i(E_n - i\Gamma/2)t/\hbar}$. В соответствии с этим определяются

<p style="text-align: center;">время жизни (квази-)уровня $\tau = \gamma^{-1}$, ширина (квази-)уровня $\Gamma = \hbar\gamma$, комплексная энергия уровня $\tilde{E}_n = E_n - i\Gamma/2$.</p>	(2.28)
--	--------

Фурье-образ выписанной волновой функции есть

$$\psi(E) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(t) e^{iEt/\hbar} dt \propto \frac{R}{E - E_n + i\Gamma_n/2}. \quad (2.29)$$

Если пренебречь в окрестности полюса зависимостью коэффициента R от E , то спектральный состав состояния выглядит как резонансная кривая с шириной $\Delta E = \Gamma$:

$$dW(E) \propto |\psi(E)|^2 \rightarrow \frac{\Gamma}{(E - E_n)^2 + \Gamma_n^2/4}. \quad (2.30)$$

При $\Gamma \rightarrow 0$ имеем $dW/dE \rightarrow \delta(E - E_n)$ (ср. (17.7)).

◇ При изучении задач рассеяния квазистационарные состояния в одномерном случае отвечают узким максимумам коэффициента прохождения, в трехмерном —

резонансам в амплитуде рассеяния, см. разд. 15.5.3. Поэтому квазистационарные состояния нередко называют *резонансами*. В одномерной задаче при резонансной энергии рассеиватель становится прозрачным, так как последовательное отражение волны от двух границ дает волну с той же фазой, при этом частица надолго задерживается над ямой, но отражения не возникает. Зависимость коэффициента прохождения от энергии вблизи резонанса имеет резонансную форму, подобную (2.30). В продолжение обсуждения в конце разд. 2.4.4 можно отметить, что обсуждаемым резонансам отвечают полюса амплитуды рассеяния в нижней полуплоскости комплексной плоскости энергии (при $E = E_n - i\Gamma/2$).

Иногда квазистационарное состояние можно интерпретировать и как состояние дискретного спектра, «вытолкнутое» в область положительных энергий небольшим изменением потенциала — *виртуальный уровень*.

◇ Последовательное описание квазистационарных состояний должно включать и историю их возникновения. От этой истории могут зависеть некоторые тонкие детали. Однако при большом времени жизни возникающая система в течение жизни подвергается внешним воздействиям и «забывает» о своей истории. В этом случае разумное **приближенное** описание сопряжено с отказом от требования сохранения вероятности. Оказывается достаточным только рассмотреть «задачу о собственных значениях» с измененным граничным условием — *требованием, чтобы на больших расстояниях оставалась только уходящая из центра волна* (которое явно нарушает сохранение вероятности). Это и дает комплексные значения энергии квазиуровня (см. пример в разд. 5.3.7).

◇ Простейший пример квазиуровня можно увидеть, рассматривая зависимость коэффициента прохождения от энергии для потенциала, имеющего вид пары одинаковых высоких и широких потенциальных барьеров, находящихся на расстоянии a друг от друга. В этом случае квазистационарные состояния имеют те же энергии E_n , что и состояния в бесконечно глубокой яме ширины a (задача 1.2), а ширину состояния можно найти с помощью указанного выше граничного условия. Тот же результат получится, если изучать энергетическую зависимость коэффициента прохождения при $E \approx E_n$.

◇ Время жизни и ширина уровня в квазиклассическом приближении вычисляются в разд. 5.3.7. Это вычисление в точности воспроизводится в задаче о прямоугольных барьерах.

◇ Для заряженной частицы возбужденные состояния нестационарны, поскольку она может переходить на нижележащий уровень, излучая фотон (излучение). Вероятность дипольного излучения, определяющая *собственную ширину уровня*, вычисляется в § 16.

§ 2.5. Некоторые правила сумм

Рассмотрим величину $R = m \sum_n (E_k - E_n) |\langle k|x|n \rangle|^2$, где E_n и E_k — энергии состояний $|n\rangle$ и $|k\rangle$ гамильтониана \hat{H} соответственно, а m — масса частицы, сумма распространяется по всем собственным состояниям. Оказывается, что эта величина

одинакова для всех квантово-механических систем. Действительно, запишем

$$\begin{aligned} R &= m \sum_n \langle k | (E_k - E_n) x | n \rangle \langle n | x | k \rangle \equiv m \sum_n \langle k | [\hat{H}, x] | n \rangle \langle n | x | k \rangle = \\ &= -i\hbar \sum_n \langle k | \hat{p} | n \rangle \langle n | x | k \rangle \equiv -\hbar \sum_n \langle k | i \hat{p} \hat{x} | k \rangle = -\hbar \langle k | i [\hat{p}, \hat{x}] | k \rangle / 2 = \hbar^2 / 2. \end{aligned}$$

Поясним последовательность равенств. Вначале мы просто вносим множитель $E_k - E_n$ под знак матричного элемента. Затем мы замечаем, что

$$\langle k | [\hat{H}, x] | n \rangle \equiv \langle k | \hat{H} x - x \hat{H} | n \rangle \equiv \langle k | (E_k - E_n) x | n \rangle \langle n | x | k \rangle$$

(действие оператора \hat{H} налево дает E_k , а направо E_n). После этого находится коммутатор $[\hat{H}, x] = -i\hbar \hat{p}$. Затем выполняется суммирование по состояниям $|n\rangle$ с помощью соотношения (1.15) (условие полноты) $\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1}$. Получившийся в результате этого суммирования оператор $\hat{F} \equiv i \hat{p} \hat{x}$ запишем в виде суммы $\hat{F} = \hat{F}_s + \hat{F}_a$,

где оператор $\hat{F}_s = 1/2(\hat{F} + \hat{F}^\dagger)$ эрмитов, а оператор $\hat{F}_a = 1/2(\hat{F} - \hat{F}^\dagger)$ — антиэрмитов. Среднее значение антиэрмитова оператора по любому физическому состоянию $|k\rangle$ равно нулю, а эрмитов оператор $\hat{F}_s = i/2(\hat{p} \hat{x} - \hat{x} \hat{p}) \equiv (i/2)[\hat{p}, \hat{x}]$. Подставляя теперь коммутатор координаты и импульса, мы находим, что $\hat{F}_s = -\hbar/2$ — число. С учетом условия нормировки $\langle k | k \rangle = 1$ отсюда и получается выписанный ответ

$$= \sum_n (E_k - E_n) |\langle k | x | n \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m}. \quad (2.31)$$

Это соотношение носит название *дипольного правила сумм Томаса-Райхе-Кука*. Оно ограничивает произвол при приближенном построении системы волновых функций и энергий любой физической системы.

Построим еще сходные правила сумм для кулоновской задачи (атом водорода) и для гармонического осциллятора. Мы рассмотрим в обоих случаях одну и ту же сумму по всем состояниям системы $Q = \sum_n (E_k - E_n)^2 |\langle k | x | n \rangle|^2$. Здесь последовательность преобразований подобна предыдущей:

$$\begin{aligned} Q &= \sum_n \langle k | (E_k - E_n) x | n \rangle \langle n | (E_k - E_n) x | k \rangle \equiv \sum_n \langle k | [\hat{H}, x] | n \rangle \langle n | [x, \hat{H}] | k \rangle = \\ &= -(i\hbar/m)^2 \sum_n \langle k | \hat{p} | n \rangle \langle n | x | p \rangle \equiv (\hbar/m)^2 \sum_n \langle k | \hat{p} \hat{p} | k \rangle = (2\hbar^2/m) \langle k | \hat{T}_{kin} | k \rangle. \end{aligned}$$

Последовательность преобразований здесь такова же, как и в предыдущем случае. Надо только не забыть, что второй коммутатор в первой строчке имеет знак, противоположный первому. Результатом является среднее значение кинетической энергии, которую мы вычисляем по теореме о вириале (разд. 2.1.4). Согласно этой теореме, среднее значение кинетической энергии осциллятора $\langle k | \hat{T}_{kin} | k \rangle = E_k/2$, а для кулоновской задачи $\langle k | \hat{T}_{kin} | k \rangle = -E_k$. Таким образом,

$$\sum_n (E_k - E_n)^2 |\langle k | x | n \rangle|^2 = \begin{cases} -2\hbar^2 E_k / m & \text{кулон} \\ \hbar^2 E_k / m & \text{осциллятор.} \end{cases} \quad (2.32)$$

Значения энергий E_k для этих систем найдены в последующих главах 4 и 7.

Следует заметить, что в суммы (2.31), (2.32) входят ВСЕ стационарные состояния гамильтониана, вклад непрерывного спектра записывается в виде интеграла по энергиям. Если не учитывать вклад непрерывного спектра, эти правила сумм превращаются в неравенства.

§ 2.6. Задачи

1. Как изменится $\psi(x, t)$ при изменении начала отсчета потенциальной энергии на величину ΔV ?
2. Как изменится вид $\psi(x, t)$ в системе отсчета, движущейся относительно первоначальной со скоростью \mathbf{v} ?
3. Для свободного движения волновая функция в начальный момент времени имеет вид $\psi(x, 0) = e^{-ax^2 + i\beta x}$. Найти зависимость этой волновой функции от времени. Вычислить плотность тока и среднее значение импульса частицы. Найти неопределенность координаты и импульса.
4. Почему теорема о вириале не выполняется для инфинитного движения?
5. Вычислить оператор $e^{a\hat{P}}$, где a — число, а \hat{P} — оператор отражения.
6. Для свободного движения найти общие собственные функции гамильтониана и оператора инверсии \mathcal{P} .
7. В бесконечно глубоком прямоугольном потенциальном ящике найти $\psi(x, t)$, если $\psi(x, 0) = A(x^2 - a^2)$.
8. Частица с массой m находится в стационарном состоянии $\psi(x)$ в поле $U(x)$. Найти энергию состояния E и $U(x)$ для случаев:
 - а) $\psi(x) = Ae^{-\alpha x^2}$; б) $\psi(x) = \begin{cases} Axe^{-\beta x} & \text{при } x > 0, \\ 0 & \text{при } x < 0. \end{cases}$
9. Для частицы в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины (2.19) покажите, что
 - все уровни можно найти из уравнения $\sin(\pi n/2 - k_1 a) = \varkappa/k_0$;
 - для всех состояний $A = \sqrt{\varkappa/(1 + \varkappa a)}$;
 - четные и нечетные уровни чередуются;
 - всегда существует хотя бы один уровень;
 - найти зависимость числа уровней от параметра $k_0 a$. Сравните результат с уровнями энергии бесконечно глубокой ямы.
10. Частица находится в поле $U(x) = -G\delta(x)$. , разд. 2.4.3.
 - а) Найти энергию и волновую функцию основного (связанного) состояния.
 - б) Вычислить разброс координат $\sqrt{\Delta x^2}$
 - в) Выразить средние значения кинетической и потенциальной энергий через энергию уровня.
 - г) Найти коэффициент прохождения $T(E)$ над этой ямой.
 - д) В начальный момент волновая функция имеет вид $\psi(x, t = 0) = \varkappa^{-1/2} e^{-\varkappa|x|}$ с \varkappa , не зависящим от G . Найти вероятность того, что при $t \rightarrow \infty$ частица окажется в связанном состоянии.
 - е) Найти энергию и волновую функцию основного состояния, решая задачу в

импульсном представлении.

11. Для барьера произвольной формы доказать равенство коэффициентов прохождения «справа» и «слева».
12. Определить уровни энергии для потенциала

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

При каком значении V в яме появляется уровень? два уровня? Сравните решения с решениями для ямы на бесконечной прямой.

13. Частица находится в связанном состоянии в «движущейся яме» $U(x, t) = -G\delta(x - vt)$. В момент $t = 0$ яма останавливается, при $t > 0$ имеем $U(x, t) = -G\delta(x)$. Найти вероятность того, что частица останется в связанном состоянии.
14. Рассмотреть частицу в поле $U = -G\delta(x - b)$ на полубесконечной прямой ($U(x < 0) = \infty$).
 - а) Найти уровни энергии и волновые функции.
 - б) В начальный момент волновая функция имеет вид $\psi(x, t = 0) = \kappa^{-1/2}e^{-\kappa|x|}$. Найти вероятность того, что при $t \rightarrow \infty$ частица останется в связанном состоянии.
15. Для частицы в поле $U(x) = -G[\delta(x + b) + \delta(x - b)]$
 - а) при $G > 0$ найти уровни энергии и волновые функции; исследовать зависимость от b , найти силы, действующие на каждую из ям в разных состояниях;
 - б) при $G > 0$ определить $\psi(x, t)$, если при $t < 0$ между ямами была непроницаемая перегородка и частица находилась в стационарном связанном состоянии вблизи левой ямы;
 - в) исследовать зависимость коэффициента прохождения от энергии и от b при разных знаках G ; показать, что при значениях b , лишь незначительно меньших того значения, когда в системе исчезает один из уровней, в коэффициенте прохождения обнаруживается виртуальный уровень (резонанс); исследовать поведение амплитуды волновой функции вблизи начала координат.
16. Для частицы в поле $U(x) = -G_1\delta(x + b) - G\delta(x - b)$ определить при каком b исчезают связанные состояния, если $G_1 = -G$.
17. Найти коэффициенты прохождения и отражения в поле

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

Указать оптическую аналогию. Чему соответствует явление потери полуволны при отражении от оптически более плотной среды в данной задаче? Рассмотреть предел $\hbar \rightarrow 0$. Найти время задержки при отражении волнового пакета от этой ступеньки.

18. Получить выражение для коэффициента прохождения частицы в поле прямоугольной потенциальной ямы (барьера) (2.19). Каковы основные черты зависимости этого коэффициента от энергии при $k_0a = n\pi/2 + \varepsilon$ при целом n и малом ε . Покажите, что поведение кривых вблизи каждого максимума амплитуды

рассеяния описывается независимыми уравнениями обычного резонансного вида, подобными (2.29), и ширина каждого из максимумов Γ мала по сравнению с расстоянием между ними ($\Gamma/\delta E = 4k/(\pi k_1)$). Для барьера особо рассмотрите случай $\kappa a \gg 1$, а также упростите выражение для коэффициента прохождения вблизи его минимумов.

19. Пучок электронов с импульсом p_z проходит между двумя плоскостями кристалла конечной длины. Найти угловое распределение электронов на выходе, если их взаимодействие с кристаллическими плоскостями описывается потенциалом
- $$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } |x| < a, \\ \infty & \text{при } |x| > a. \end{cases}$$

Указание. Связать угловое распределение с распределением электронов по p_x в указанном потенциале.

20. Найти энергии и волновые функции связанных состояний в поле $U(x) = -G\delta(x-a) - CG\delta(x) - G\delta(x+a)$. При каких a число уровней уменьшается до двух, до одного, до нуля? Найти энергии уровней при $a \rightarrow 0$ и при $a \rightarrow \infty$. По какому закону стремятся эти энергии к пределу при $a \rightarrow \infty$. Как зависит коэффициент прохождения от энергии?

Разобрать случаи $c = 1, -1, -4$. Что общего в этих случаях при описании пределов $a \rightarrow 0$ и $a \rightarrow \infty$.

21. Взаимодействие протона и нейтрона, приводящее к образованию дейтона, можно аппроксимировать прямоугольной потенциальной ямой с шириной 1,2 Фм и глубиной U . Энергия связи дейтона составляет очень малую величину 2,2 МэВ. Определить U .
22. *Определить время задержки* на очень глубокой потенциальной яме для волнового пакета с $\langle E \rangle \approx E_n$, $\langle \Delta E \rangle \ll \Gamma$ (учесть существование резонанса).

Глава 3

ЗАВИСИМОСТЬ ОПЕРАТОРОВ ОТ ВРЕМЕНИ

§ 3.1. Оператор эволюции системы во времени

Определим оператор эволюции системы во времени $\hat{U}(t, 0)$:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, 0)|\psi(0)\rangle. \quad (3.1a)$$

Уравнение Шредингера для этого оператора и соответствующее граничное условие имеют вид:

$$i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{H}(t)\hat{U}, \quad \hat{U}(0) = 1. \quad (3.1b)$$

Если гамильтониан не меняется со временем (как это имеет место в большинстве рассматриваемых в этом курсе задач), то из (3.1б) получается

$$\hat{U}(t, 0) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \quad (3.2)$$

Действие этого оператора на стационарные состояния описывается соотношением $\hat{U}|n\rangle = \exp(-iE_n t/\hbar)|n\rangle$, а на произвольное состояние — законом эволюции (2.3). Из эрмитовости гамильтониана следует, что оператор \hat{U} — *унитарный*:

$$\hat{U}^{-1}(t, 0) \equiv \hat{U}(-t, 0) = e^{i\hat{H}t/\hbar} = \hat{U}(t, 0)^\dagger. \quad (3.3)$$

■ При изучении явлений, развивающихся во времени, следует иметь в виду, что физический смысл имеют только наблюдения «до начала событий» и «после конца событий». Наблюдение в промежуточный момент необратимо меняет эволюцию системы. Поэтому полезным является оператор эволюции для периода времени от $-\infty$ до ∞ . Его называют **матрицей рассеяния**, или ***S*-матрицей** (*Гайзенберг*):

$$\hat{S} = \hat{U}(\infty, -\infty). \quad (3.4)$$

§ 3.2. Гайзенберговская картина

Разбирая соотношение неопределенностей в § 1.8, мы рассматривали одновременные измерения разных величин. Представляют интерес и другие задачи. Так, чтобы понять, с какой минимальной погрешностью можно говорить о траектории частицы, нужно получить какое-то соотношение неопределенностей для координат в разные моменты времени. Далее мы обсудим путь, ведущий к естественному ответу на этот и другие вопросы.

◇ Задача квантовой механики состоит в построении правильного описания измеряемых величин — средних $\langle A(t) \rangle$.

В предшествующем построении мы фиксировали некоторые определения операторов и рассматривали волновые функции, зависящие от времени. Это — **шредингеровская картина**. В ней операторы $\hat{\mathbf{r}}$ и $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ не зависят от t ; среднее значение физической величины A есть

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

где $\psi(\mathbf{r}, t)$ удовлетворяет уравнению Шредингера (2.1).

То же самое среднее $\langle A(t) \rangle$ можно получить и в **гайзенберговской картине**, где вся зависимость от времени переносится на операторы физических величин \hat{A}_H , а векторы состояний «замораживаются» в начальный момент. Именно на этом пути получается ответ на задачу, поставленную в начале раздела.

◇ Для перехода к гайзенберговской картине мы используем оператор эволюции системы $\hat{U}(t, 0)$ (3.1):

$$\langle A(t) \rangle = \langle \psi(\mathbf{r}, 0) | \hat{A}_H(t) | \psi(\mathbf{r}, 0) \rangle, \quad \hat{A}_H(t) \equiv \hat{U}^{-1}(t, 0) \hat{A} \hat{U}(t, 0). \quad (3.5)$$

Далее в этой главе операторы и векторы состояния в гайзенберговской картине мы снабжаем индексом H , а в использовавшейся ранее (шредингеровской) — индексом S , причем $|\psi_H\rangle = |\psi_S(t=0)\rangle$. Повторим, что наше определение означает, что $\langle A \rangle_H = \langle A \rangle_S$. Поэтому при записи средних значок H или S не нужен.

§ 3.3. Производная оператора по времени

Если гамильтониан системы не зависит от времени явно, то оператор эволюции (3.2) коммутирует с гамильтонианом, и $\hat{H}_H(t) = \hat{H}$. Мы рассмотрим ниже именно этот случай.

В гайзенберговской картине вся зависимость от времени дается эволюцией оператора со временем: $i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi_S | \hat{A} | \psi_S \rangle = i\hbar \langle \psi_H | \frac{d\hat{A}_H}{dt} | \psi_H \rangle$. Раскроем производную в левой части равенства: $i\hbar \left(\left\langle \frac{d\psi_S}{dt} | \hat{A} | \psi_S \right\rangle + \langle \psi_S | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi_S \right\rangle + \langle \psi_S | \hat{A} | \frac{d\psi_S}{dt} \rangle \right)$. Используя для $d\psi_S/dt$ уравнение Шредингера (2.1) (как это делалось и в начале § 2.2), получим

$$i\hbar \langle \psi_H | \frac{d\hat{A}_H}{dt} | \psi_H \rangle = \langle \psi_S | \left[i\hbar \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} - \hat{H} \hat{A} + \hat{A} \hat{H} \right] | \psi_S \rangle.$$

Определяя еще частную производную гейзенберговского оператора по времени соотношением $\partial \hat{A}_H / \partial t = U^{-1}(\partial \hat{A}_S / \partial t)U$, мы получаем *уравнение движения для оператора в гейзенберговской картине*:

$$i\hbar \frac{d\hat{A}_H}{dt} = i\hbar \cdot \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} + [\hat{A}_H, \hat{H}] \quad (3.6)$$

Заметим, что в классической механике $dA/dt = \partial A / \partial t - \{H, A\}$, где $\{H, A\}$ — скобки Пуассона $(\partial H / \partial q)(\partial A / \partial p) - (\partial H / \partial p)(\partial A / \partial q)$. Это означает, что $[A, H] / (i\hbar)$ — квантовый аналог скобок Пуассона. Такое соответствие иногда используют для *квантования* некоторых физических систем.

• Вычислим с помощью (3.6) производные от операторов координаты и импульса по времени,

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} &= \frac{[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}]}{i\hbar} \equiv \frac{[\hat{\mathbf{r}}, \hat{p}^2]}{2mi\hbar} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}, \\ \frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} &= \frac{[\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}]}{i\hbar} \equiv \frac{[\hat{\mathbf{p}}, U(r)]}{i\hbar} = -\nabla U(r). \end{aligned} \quad (3.7a)$$

Итак, операторы скорости и изменения импульса имеют тот же вид, что и в классической механике. Отсюда получается операторная форма второго закона Ньютона

$$\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \frac{d}{dt} \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{1}{m} \frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = -\frac{\nabla U}{m}. \quad (3.7b)$$

Ясно, что эти уравнения выполняются и для средних величин, т. е. законы классической механики выполняются для *средних значений квантовых физических величин (теорема Эренфеста)*.

• При известном виде потенциала $U(r)$ интегрирование уравнений (3.7) позволяет получить в явном виде зависимость координат и импульсов от времени. После этого вычисление коммутаторов вида $[x(t), x(t')]$, соответствующих перестановочных соотношений и соотношений неопределенности является уже не очень сложной задачей.

◇ *Пример:* для гармонического осциллятора с $\hat{H} = m\omega^2 x^2 / 2$ операторы $\hat{x}_H(t)$ и $\hat{p}_H(t)$ выражаются через их начальные значения (в момент времени 0) \hat{x} и \hat{p} соотношениями

$$\begin{aligned} \hat{x}_H(t) &= \hat{x} \cos(\omega t) + \hat{p} \sin(\omega t) / (m\omega), \\ \hat{p}_H(t) &= \hat{p} \cos(\omega t) - m\omega \hat{x} \sin(\omega t). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Теперь уже нетрудно получить, например, коммутатор координат в разные моменты времени и соответствующее соотношение неопределенностей

$$\begin{aligned} [\hat{x}(t), \hat{x}(t + \tau)] &= i\hbar \sin(\omega\tau) / (m\omega) \Rightarrow \\ \Rightarrow \Delta x(t) \Delta x(t + \tau) &\geq \hbar |\sin(\omega\tau)| / (2m\omega). \end{aligned} \quad (3.9)$$

§ 3.4. Сложные системы. Представление взаимодействия

В ряде задач, в том числе при описании строения твердого тела и взаимодействий элементарных частиц, используют *представление взаимодействия*, промежуточное между гайзенберговской и шредингеровской картинами. Пусть гамильтониан системы представим в виде суммы известного не зависящего от времени *свободного* гамильтониана \hat{H}_0 и *возмущения* (взаимодействия) \hat{V} , зависящего от времени:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}. \quad (3.10)$$

Обозначим через \hat{U}_0 оператор эволюции вида (3.2), отвечающий *свободному* гамильтониану $\hat{U}_0 = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$.

В представлении взаимодействия оператор физической величины A принимает вид \hat{A}_I :

$$\hat{A}_I(t) = \hat{U}_0^{-1}(t)\hat{A}\hat{U}_0(t). \quad (3.11)$$

Иными словами, в этом представлении зависимость операторов от времени определяется *свободным* гамильтонианом (3.11) (подобно тому, как это имело место для гайзенберговской картины) а за волновыми векторами сохраняется временная зависимость, обусловленная взаимодействием. Уравнение Шредингера в представлении взаимодействия (14.4) выписано на стр. 219.

Стартуя от описания системы \hat{H}_0 , оператор эволюции системы в целом, вообще говоря, не удастся записать в форме, подобной (3.2), поскольку операторы \hat{H}_0 и $\hat{V}(t)$ могут не коммутировать. Однако, если взаимодействие V достаточно слабое, то с помощью оператора взаимодействия в представлении свободного гамильтониана (3.11) можно записать первые члены ряда для оператора эволюции в виде

$$\hat{U}(t, 0) \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{V}_I(t') dt' + \dots \quad (3.12)$$

• При выделении взаимодействия из полного гамильтониана почти всегда фактически используются **адиабатическое допущение Эренфеста**:

Имеется в виду, что в далеком прошлом взаимодействие отсутствовало, а затем оно включилось очень медленно — *адиабатически*. Такой подход фактически скрыт и в § 5.2 и в гл. 14. Он используется явно при построении теории элементарных частиц в книге [19].

§ 3.5. Задачи

- Найти операторы координаты и импульса в зависимости от времени
 - для свободной частицы,
 - для частицы в однородном поле $U(x) = -Fx$.
 - Покажите, что для гармонического осциллятора ($U(x) = m\omega^2 x^2/2$) получается решение (3.8).
- Вычислив оператор скорости частицы как $[r, \hat{H}]/i\hbar$, покажите, что его среднее значение при финитном движении равно нулю.

3. Найти средние $\langle x(t) \rangle$, $\langle p(t) \rangle$, $\langle \Delta x^2(t) \rangle$, $\langle \Delta p^2(t) \rangle$ в перечисленных выше случаях.
4. Найти средние $\langle x(t) \rangle$, $\langle p(t) \rangle$, $\langle \Delta x^2(t) \rangle$, $\langle \Delta p^2(t) \rangle$ для свободной частицы в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi(x, 0) = A \exp[ip_0 x/\hbar - (x - x_0)^2/4a^2]$.
5. Для электрона в атоме водорода найти $d\hat{\mathbf{r}}/dt$ и $d^2\hat{\mathbf{r}}/dt^2$.
6. Найти перестановочные соотношения $[\hat{x}(t), \hat{p}(t')]$, $[\hat{x}(t), \hat{x}(t')]$ для операторов координат и импульса в разные моменты времени и соответствующие соотношения неопределенности в случаях: свободного движения, однородного поля и гармонического осциллятора.
То же для произвольного поля $U(x)$ при малых $|t' - t|$.
7. Найти перестановочное соотношение для операторов кинетической энергии осциллятора, взятых в разные моменты времени. Записать соответствующее соотношение неопределенностей.

Глава 4

ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Гармонический осциллятор — важнейший объект в квантовой механике и во многих ее приложениях. Многие свойства сложных систем можно понять, используя развитые для этой задачи методы.

Его гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (4.1)$$

Введем естественные в нашей задаче единицы длины x_0 , импульса p_0 и энергии $\hbar\omega$

$$p_0 = \sqrt{m\hbar\omega}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}; \quad \xi = \frac{x}{x_0}; \quad (4.2a)$$

$$\hat{H} = \hbar\omega\hat{\varepsilon}, \quad \hat{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\hat{p}}{p_0} \right)^2 + \left(\frac{\hat{x}}{x_0} \right)^2 \right], \quad E = \hbar\omega\varepsilon. \quad (4.2b)$$

§ 4.1. Одномерный осциллятор. Операторный метод

Используемый ниже метод решения очень полезен для разнообразных приложений и обобщений. В его основе — определение новых неэрмитовых операторов

$$\begin{aligned} \hat{b} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} + i \frac{\hat{p}}{p_0} \right) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right); \\ \hat{b}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} - i \frac{\hat{p}}{p_0} \right) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Эти операторы не описывают какие-либо измеримые физические величины. Однако, через них можно выразить операторы всех физических величин (т. к. через них выражаются операторы координаты и импульса)¹.

¹В задаче об осцилляторе в классической механике соотношения вида (4.3) определяют классические переменные b и b^* . В классической задаче \hbar — просто размерная величина, обозначаемая так же, как

Нетрудно убедиться, что имеет место соотношение

$$[\hat{b}, \hat{b}^+] = 1. \quad (4.4)$$

С его учетом гамильтониан (4.2б) принимает вид

$$\hat{H} = \hbar\omega \hat{\varepsilon}, \quad \hat{\varepsilon} = \hat{b}^+ \hat{b} + 1/2. \quad (4.5)$$

Проверьте, что

$$\begin{aligned} [\hat{b}^+ \hat{b}, \hat{b}] &= -\hat{b} \Rightarrow [\hat{\varepsilon}, \hat{b}] = -\hat{b}; \\ [\hat{b}^+ \hat{b}, \hat{b}^+] &= \hat{b}^+ \Rightarrow [\hat{\varepsilon}, \hat{b}^+] = \hat{b}^+. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Пусть $|n\rangle$ — собственный вектор \hat{H} с энергией $E_n = \hbar\omega\varepsilon_n$, $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$. Рассмотрим действие гамильтониана на состояние $\hat{b}|n\rangle$. Используя соотношения (4.6), получаем цепочку равенств

$$\hat{\varepsilon}(\hat{b}|n\rangle) \equiv (\hat{\varepsilon}\hat{b})|n\rangle = (\hat{b}\hat{\varepsilon} - \hat{b})|n\rangle = \hat{b}\varepsilon_n|n\rangle - \hat{b}|n\rangle \equiv (\varepsilon_n - 1)\hat{b}|n\rangle.$$

Отсюда следует

$$\hat{\varepsilon}|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle \Rightarrow \begin{cases} \hat{\varepsilon}\hat{b}|n\rangle = (\varepsilon_n - 1)\hat{b}|n\rangle; \\ \hat{\varepsilon}\hat{b}^+|n\rangle = (\varepsilon_n + 1)\hat{b}^+|n\rangle, \end{cases} \quad \text{т. е.} \quad (4.7)$$

если $|e\rangle$ — собственный вектор гамильтониана с энергией E_b , то $\hat{b}|e\rangle$ и $\hat{b}^+|e\rangle$ — тоже его собственные векторы с энергиями $E_b - \hbar\omega$ и $E_b + \hbar\omega$ соответственно.

Гамильтониан осциллятора представляет собой сумму квадратов двух операторов. Поэтому возможные значения его энергии ограничены снизу. Обозначим наименьшее значение энергии осциллятора через E_0 и соответствующий волновой вектор через $|0\rangle$, т. е. $\hat{H}|0\rangle = E_0|0\rangle$. Но тогда в силу (4.7) должно быть $\hat{H}\hat{b}|0\rangle = (E_0 - \hbar\omega)\hat{b}|0\rangle$. Таким образом, вектор $\hat{b}|0\rangle$ должен соответствовать состоянию с энергией меньшей, чем E_0 . Но такого состояния не существует. Поэтому должно быть¹

$$\hat{b}|0\rangle = 0. \quad (4.8)$$

Подстановка этого соотношения в (4.5) дает $\varepsilon_0 = 1/2$.

В силу (4.7) действие оператора \hat{b}^+ на состояние $|0\rangle$ дает состояние с более высокой энергией $|1\rangle$, действие этого оператора на состояние $|1\rangle$ дает состояние с еще более высокой энергией $|2\rangle$, и т. д. Таким способом получается весь набор уровней осциллятора:

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &= (n + 1/2), \quad E_n = \hbar\omega(n + 1/2); \\ \hat{b}^+|n\rangle &= d_n|n + 1\rangle \quad (n = 0, 1, 2 \dots). \end{aligned} \quad (4.9)$$

и квант действия. В этих переменных гамильтониан (классический) есть $H = \hbar\omega b^* b$ (ср. для квантового случая (4.5)). Величины b и $i\hbar b^*$ оказываются парой канонических переменных со скобками Пуассона $\{b, i\hbar b^*\} = 1$ и с простой зависимостью от времени $b(t) = b_0 e^{-i(\omega t + \phi)}$, $b^*(t) = b_0^* e^{i(\omega t + \phi)}$. Квантование, заменяющее переменные b и b^* на операторы \hat{b} и \hat{b}^+ , как обычно, отвечает переходу скобок Пуассона в коммутатор, умноженный на $i\hbar$.

¹Решение этого уравнения в x -представлении имеет вид (4.19).

Итак, оператор \hat{b} понижает энергию состояния на $\hbar\omega$, а оператор \hat{b}^+ — повышает, и оператор $\hat{b}^+\hat{b}$ имеет собственными значениями целые числа,

$$\hat{b}^+\hat{b}|n\rangle = n|n\rangle \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (4.10)$$

Это служит основой широко используемой интерпретации:

• *n-е состояние осциллятора содержит n тождественных частиц — «вибронов» с энергией $E = \hbar\omega$. Оператор \hat{b}^+ — оператор рождения вибрана, оператор \hat{b} — оператор уничтожения вибрана, оператор $\hat{n} = \hat{b}^+\hat{b}$ есть оператор числа вибронов¹.*

Определим теперь числа d_n в соотношении между волновыми векторами (4.9), считая их нормированными ($\langle n|n\rangle = 1$) и действительными. Прежде всего, вектор, сопряженный вектору $\hat{b}|n\rangle$, есть $\langle n|\hat{b}^+ = d_n\langle n-1|$. Таким образом, $\langle n|\hat{b}^+\hat{b}|n\rangle = n\langle n|n\rangle = d_n^2\langle n-1|n-1\rangle$. Отсюда следует $d_n^2 = n$, т. е. $\hat{b}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$. Подобным образом получается и сопряженное соотношение

$$\left. \begin{aligned} \hat{b}|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle, \\ \hat{b}^+|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{aligned} \right\} \Rightarrow |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{b}^+)^n |0\rangle. \quad (4.11)$$

• **Четность состояний осциллятора.** Заметим, что гамильтониан осциллятора коммутирует с оператором отражения. Поэтому собственные состояния осциллятора обладают определенной четностью. Основное состояние $|0\rangle$ четно, а операторы \hat{b} и \hat{b}^+ меняют знак при отражении, т. е. нечетны. Поэтому состояние $|n\rangle = (\hat{b}^+)^n|0\rangle/\sqrt{n!}$ имеет четность $(-1)^n$,

$$\hat{P}|n\rangle = (-1)^n|n\rangle. \quad (4.12)$$

• **Энергетическое представление.** Найденные состояния $|n\rangle$ образуют базис энергетического представления для осциллятора (*представления чисел заполнения «вибронов»*). Запишем теперь некоторые операторы в этом представлении, т. е. в виде матриц, строки и столбцы которых — номера состояний n (ср. (1.17)).

Для гамильтониана и операторов \hat{b} , \hat{b}^+ ответы выписаны в соотношениях (4.9), (4.11), которые принимают вид:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 3 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 5 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 7 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (4.13a)$$

$$\hat{b}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (4.13b)$$

¹Виброны — «домашнее» название в этой главе. В реальных задачах это кванты звуковых колебаний (фононы), электромагнитных колебаний (фотоны) и т. п.

$$\hat{b} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (4.13в)$$

◇ Чтобы найти вид операторов координаты и импульса в энергетическом представлении, выразим их через операторы \hat{b} и \hat{b}^+ (4.3):

$$\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{b} + \hat{b}^+), \quad \hat{p} = \frac{p_0}{i\sqrt{2}}(\hat{b} - \hat{b}^+). \quad (4.14)$$

После этого получается

$$\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (4.15)$$

$$\hat{p} = \frac{ip_0}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

■ **Неопределенности координат и импульсов в собственных состояниях осциллятора.** В силу теоремы о вириале средние значения кинетической и потенциальной энергий осциллятора в его собственном состоянии совпадают:

$$\langle p^2/(2m) \rangle_n = \langle m\omega^2 x^2/2 \rangle_n = (\hbar\omega/2)(n + 1/2).$$

Отсюда следует $\langle x^2 \rangle_n = x_0^2(n + 1/2)$, $\langle p^2 \rangle_n = p_0^2(n + 1/2)$. Эти соотношения нетрудно получить и прямо из определений операторов \hat{b} или из матричного представления (4.15).

Средние значения координаты и импульса в собственных состояниях равны нулю. (Это следует из симметрии гамильтониана и отсутствия вырождения, и это фактически записано в соотношениях (4.15)). Поэтому выписанные выше соотношения дают прямо значения неопределенностей в собственных состояниях

$$\Delta x = x_0\sqrt{n + 1/2}, \quad \Delta p = p_0\sqrt{n + 1/2} \Rightarrow \Delta x \Delta p = \hbar(2n + 1)/2. \quad (4.16)$$

Таким образом, произведение неопределенностей координаты и импульса достигает наименьшего значения, отвечающего соотношению неопределенностей (1.25) только в основном состоянии осциллятора, в n -м возбужденном состоянии произведение неопределенностей в $(2n + 1)$ раз больше.

4.1.1. Явная форма оператора отражения координат любой системы

Рассмотрим оператор

$$\hat{\mathcal{P}} = e^{i\pi\hat{b}^+\hat{b}}. \quad (4.17)$$

В соответствии с (4.12), действие этого оператора на собственные состояния осциллятора определяется соотношением

$$\hat{\mathcal{P}}\psi_n(x) = e^{i\pi n}\psi_n(x) = (-1)^n\psi_n(x) = \psi_n(-x). \quad (4.18)$$

Набор волновых функций осциллятора является полным. Поэтому для любой волновой функции можно записать $\psi(x) = \sum c_n\psi_n(x)$. Соотношение (4.18) показывает, таким образом, что оператор (4.17) выражает в явной форме через операторы координаты и импульса оператор отражения координат, если операторы рождения и уничтожения заданы соотношениями (4.3) с произвольными p_0 и x_0 , удовлетворяющими условию $p_0x_0 = \hbar$. Этот вывод справедлив для любой физической системы.

Ясно, что в трехмерном случае оператор отражения координат имеет вид (4.17), в котором $\hat{b}^+\hat{b}$ заменяется на сумму произведений таких операторов по всем трем осям,

$$\hat{b}^+\hat{b} \rightarrow \hat{b}_x^+\hat{b}_x + \hat{b}_y^+\hat{b}_y + \hat{b}_z^+\hat{b}_z.$$

4.1.2. Переход к координатному представлению

Чтобы найти волновую функцию основного состояния осциллятора $\psi_0(x)$ в x -представлении, запишем уравнение (4.8) в этом представлении

$$[x/x_0 + x_0(d/dx)]\psi_0(x) = 0.$$

Отсюда (коэффициент $\pi^{-1/4}$ получен из условия нормировки)

$$\psi_0(\xi) = \pi^{-1/4} e^{-\xi^2/2} \Rightarrow \psi_0(x) = \pi^{-1/4} x_0^{-1/2} e^{-x^2/2x_0^2}. \quad (4.19)$$

Соответственно

$$\begin{aligned} \psi_n(\xi) &= \frac{\hat{b}^+\psi_{n-1}}{\sqrt{n}} = \frac{1}{\sqrt{2n}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \psi_{n-1} \equiv -\frac{e^{\xi^2/2}}{\sqrt{2n}} \frac{d}{d\xi} \left(e^{-\xi^2/2} \psi_{n-1} \right) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \psi_n(\xi) = \pi^{-1/4} \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!}} e^{\xi^2/2} \left(\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2} \equiv \frac{\pi^{-1/4} e^{-\xi^2/2}}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Последнее равенство можно интерпретировать как определение *полиномов Эрмита* $H_n(\xi)$. В частности,

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

На рис. 4.1 показаны квадраты волновых функций (плотности вероятности) осциллятора для «глубоко квантового случая» $n = 0$ и «почти классического случая» $n = 30$.

В соответствии с (4.12) волновые функции состояний с четным значением n — четные, а для нечетных n они нечетные.

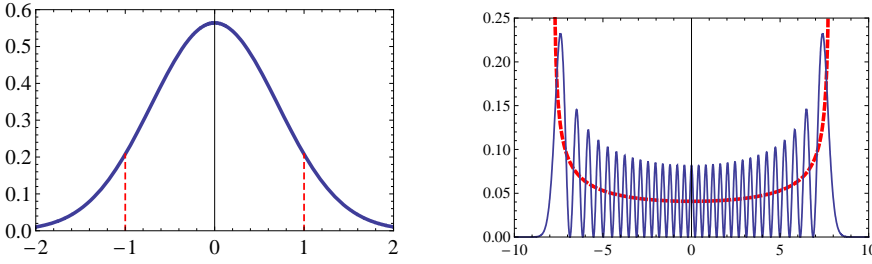


Рис. 4.1. Квадраты волновых функций (плотности вероятности) состояний с $n = 0$ (слева) и $n = 30$ (справа). Пунктиром справа показана соответствующая классическая плотность вероятности при той же энергии.

4.1.3. Двумерный симметричный осциллятор

Гамильтониан двумерного симметричного осциллятора имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2). \quad (4.21a)$$

Переменные x и y разделяются так, что можно ввести операторы рождения и уничтожения (4.3) для движения по каждой из этих осей, снабдив их значками x и y соответственно. С их помощью повторением предыдущих выкладок гамильтониан записывается в виде

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{b}_x^+ \hat{b}_x + \hat{b}_y^+ \hat{b}_y + 1). \quad (4.21b)$$

Соответствующие значения энергии

$$E_n = \hbar\omega(n + 1), \quad \text{где } n = n_x + n_y. \quad (4.22)$$

вырождены $(n + 1)$ -кратно (каждое значение энергии может реализовываться $(n + 1)$ -им способом, с разными n_x и n_y). В силу (2.12) это означает, что существует по крайней мере два различных оператора, коммутирующих с гамильтонианом и не коммутирующих друг с другом.

В нашем случае мы можем выбрать в качестве таких операторов

$$A_y^x = \hat{b}_x^+ \hat{b}_y, \quad \text{и} \quad A_x^y = \hat{b}_y^+ \hat{b}_x. \quad (4.23)$$

Легко проверить прямым коммутированием, что эти операторы перестановочны с гамильтонианом, но мы воспользуемся другим, весьма поучительным приемом. Обозначим собственное состояние нашего осциллятора с заданными значениями n_x и n_y через $|n_x, n_y\rangle$. Тогда

$$A_y^x |n_x, n_y\rangle = \sqrt{(n_x + 1)n_y} |n_x + 1, n_y - 1\rangle,$$

$$A_x^y |n_x, n_y\rangle = \sqrt{(n_y + 1)n_x} |n_x - 1, n_y + 1\rangle.$$

Иными словами действие наших операторов на собственное состояние $|n_x, n_y\rangle$ не меняет сумму $n_x + n_y = n$, т. е. не меняет энергию.

Нетрудно убедиться также, что эти операторы не коммутируют между собой:

$$[A_y^x, A_x^y] = -(\hat{b}_x^+ \hat{b}_x + \hat{b}_y^+ \hat{b}_y).$$

Наконец, полезно выразить через эти операторы оператор проекции момента импульса на ось z . Прямая подстановка (4.3) дает

$$\hat{L}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x = -i\hbar(A_y^x - A_x^y) \equiv -i\hbar(\hat{b}_x^+ \hat{b}_y - \hat{b}_y^+ \hat{b}_x). \quad (4.24)$$

4.1.4. Применение к неосцилляторным системам

Метод операторов рождения и уничтожения можно распространить и на другие, неосцилляторные системы с дискретным спектром. Для этого заметим, что введенные выше операторы \hat{b} , \hat{b}^+ имеют некоторое сходство с проекционными операторами (1.14). Поэтому их можно записать схожим образом. Для этого домножим (4.11) справа на вектор $\langle n|$ и просуммируем по всем значениям n . Тогда (поскольку $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$)

$$\begin{aligned} \sum_n \hat{b}^+ |n\rangle\langle n| &= \sum_n \sqrt{n+1} |n+1\rangle\langle n| \Rightarrow \\ \Rightarrow \hat{b}^+ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1} |n+1\rangle\langle n|, \quad \hat{b} = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n} |n-1\rangle\langle n|. \end{aligned} \quad (4.25)$$

(Второе соотношение получается точно так же, как и первое.)

В частности, для бесконечно глубокой потенциальной ямы

$$\hat{H} = E_1(\hat{b}^+ \hat{b} + 1)^2, \quad E_n = E_1(n+1)^2.$$

§ 4.2. Решение с помощью разложения в ряд

Запишем уравнение Шредингера в безразмерных переменных:

$$d^2\psi/d\xi^2 = (\xi^2 - 2\varepsilon)\psi.$$

При $\xi \rightarrow \pm \infty$ оно упрощается: $\psi'' \approx \xi^2\psi$, и из него получается $\psi \rightarrow e^{\pm\xi^2/2}$, граничные условия (2.18) выбирают знак *минус*.

Ищем решение в виде $\psi = e^{-\xi^2/2}v(\xi)$. Для функции v получается уравнение $v'' - 2\xi v' + (2\varepsilon - 1)v = 0$. Далее ищем v в виде ряда $v = \sum a_n \xi^n$. Подставляя этот ряд в уравнение, получаем

$$\sum_n \xi^n [(2\varepsilon - 2n - 1)a_n + (n+1)(n+2)a_{n+2}] = 0.$$

Отсюда получается рекуррентное соотношение для коэффициентов a_n : $a_{n+2} = \frac{2n+1-2\varepsilon}{(n+1)(n+2)}a_n$. При больших n это соотношение принимает вид

$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_{n+2}}{a_n} = \frac{2}{n} \rightarrow 0$, который обеспечивает сходимость ряда для всех ξ . Однако, с ростом величины $\xi \rightarrow \pm\infty$ такое решение растёт слишком быстро $v(\xi) \rightarrow e^{\xi^2}$. Это соответствует отброшенному решению уравнения, для которого не выполняется граничное условие (2.18), т. к. $\psi(\xi \rightarrow \pm\infty) \rightarrow \infty$. Граничное условие выполняется, только если ряд для $v(\xi)$ обрывается на каком-нибудь n -м члене, т. е. если $2n + 1 - 2\varepsilon = 0$. Это и есть условие для определения собственного значения гамильтониана — энергии осциллятора (4.9). При этом волновые функции имеют вид (4.20), коэффициенты входящих сюда полиномов Эрмита связаны приведенными выше рекуррентными соотношениями.

§ 4.3. «Нулевые колебания» осциллятора и возможности их наблюдения

На первый взгляд, слагаемое $\hbar\omega/2$ в энергии осциллятора (4.9) не имеет серьезного смысла, поскольку может быть устранено простым сдвигом начала отсчета энергии («перенормировка энергии»). Во многих случаях такой подход оправдан. Однако, здесь надо быть осторожным, поскольку существуют физические явления, в которых «нулевые колебания» осциллятора приводят к наблюдаемым эффектам.

- **Дифракция на кристалле.** Условия дифракции рентгеновских лучей или нейтронов на трехмерном идеальном кристалле приводят к тому, что дифракционная картина представляет собой набор точек (дифракция Вульфа–Брэгга, см. [18]). В реальном кристалле ионы смещаются из точек равновесия из-за теплового движения. Поэтому точки дифракционной картины размываются в небольшие пятна. При понижении температуры размер этих пятен уменьшается, и естественно ожидать, что при $T \rightarrow 0$ пятна превратятся в точки, размер которых определяется только зернистостью приемника.

В действительности, колебания ионов кристалла представимы в виде нормальных гармонических колебаний решетки (см. § 8.3), каждое из которых при нулевой температуре имеет нулевые колебания и соответствующий разброс координат (4.16) даже при $n = 0$. Поэтому даже при нулевой температуре положения ионов отличаются от идеальной периодичности, и рентгеновские блики представляют собой не точки, а пятна, из чьих размеров можно получать дополнительные сведения о структуре кристаллической решетки данного вещества.

Для одного осциллятора с частотой ω амплитуда нулевых колебаний имеет вид (4.16) $\langle x^2 \rangle_0 = \hbar/(m\omega)$. В кристалле каждый ион участвует в разнообразных колебаниях решетки (см. ниже, § 8.3) со спектром (плотностью числа колебаний на единицу интервала частот) $\rho(\omega)$. В квадрате смещения иона от положения равновесия вклады всех этих колебаний складываются так, что¹

$$\langle x^2 \rangle_0 \propto \int \frac{\hbar}{m\omega} \rho(\omega) d\omega. \quad (4.26)$$

¹ Эта величина сходится, поскольку обычно при малых ω имеем $\rho(\omega) \propto \omega^2$ и спектр возможных частот колебаний в кристалле ограничен сверху.

При конечной температуре T под интеграл добавляется множитель, обусловленный Планковским распределением, $\text{cth}(\hbar\omega/(2kT))$. Эту величину называют *фактором Дебая-Валлера* — см. также (8.40).

• **Давление вакуума (силы Казимира)**. Электромагнитные колебания в объемных резонаторах можно представить себе как набор осцилляторов с длинами волн, отвечающими целому числу полуволн по каждому из направлений. Энергия каждого из этих осцилляторов не меньше, чем $\hbar\omega/2$ (см. подробнее §12.3). При увеличении размеров полости набор возможных частот осцилляторов увеличивается, увеличивается и суммарная энергия «нулевых колебаний вакуума». В бесконечном пространстве набор частот электромагнитных колебаний бесконечен, и в расчетах грозят появиться бесконечные расходящиеся выражения типа $\sum \hbar\omega_i/2$. На самом деле, спектр электромагнитных колебаний вакуума ограничен сверху, например, условием $\hbar\omega < 2m_e c^2$ (рождение e^+e^- пар из вакуума), и этот спектр не непрерывен, как это было бы в случае бесконечного пространства, а дискретен, поскольку наше пространство конечно, т. е. указанные бесконечности должны превратиться просто в очень большие числа. Однако в доброкачественной теории наблюдаемые эффекты не могут зависеть от деталей явлений при сверхбольших или сверхмалых расстояниях, в соответствии с общим принципом:

хорошее описание явлений в какой-либо области параметров окружающего мира включает только объекты, определяемые в этой области параметров.

В соответствии с этим, энергию нулевых колебаний часто принимают за начало отсчета и исключают из анализа. Тем не менее, учет нулевых колебаний приводит к наблюдаемому эффекту — давлению на металлическую пластинку, обусловленному разностью энергий *электромагнитного поля* с двух ее сторон.

Подчеркнем, что в последующем вычислении речь идет только о колебаниях электромагнитного поля, поскольку лишь это поле поглощается в металле. В частности, например, гравитационное поле не дает вклада в обсуждаемые силы.

▼ Рассмотрим три параллельных металлических пластины 1, 2 и 3, перпендикулярных оси z так, что расстояния между пластинами 1 и 2 составляют ℓ , а между пластинами 2 и 3 — L , и $L \gg \ell$. Для определенности будем считать пластины прямоугольными с размерами X и Y , причем $X, Y \gg \ell, L$. Области между пластинами 1 и 2 или 2 и 3 назовем областями 12 и 23 соответственно. Площадь пластины $S_{xy} = XY$.

Частоты колебаний электромагнитного поля между пластинами выражаются через значения волнового вектора, $\omega_i = ck_i \equiv c\sqrt{k_{\perp}^2 + k_z^2}$, где поперечная компонента $\mathbf{k}_{\perp} = \left(\frac{\pi s_x}{X}, \frac{\pi s_y}{Y}\right)$ принимает одни и те же значения в обеих областях 12 и 23, а возможные значения продольных компоненты различны, $k_z = \pi s_z/\ell$ в области 12 и $k_z = \pi s_z/L$ в области 23 (в каждом направлении укладывается целое число полуволн). Таким образом, в области 23 волновые векторы расположены «гуще», чем в области 12. Поэтому плотность энергии нулевых колебаний (и соответствующее давление поля) в области 23 больше, чем в области 12. В результате и появляется

сила, действующая на пластину 2 (эффективное притяжение к пластине 1) (Казимир, 1948).

При малых температурах, когда тепловые колебания пластин не возбуждаются, рассматриваемая энергия нулевых колебаний

$$E_0 = \sum_{s_i, \lambda} \hbar \omega_i / 2 \quad (4.27a)$$

играет роль обычной термодинамической внутренней энергии излучения. Здесь $s_i = s_x, s_y, s_z$ — целые числа, а λ указывает поляризацию волны. В нашей задаче суммирование по поляризациям сводится просто к удвоению суммы по волновым числам.

Создаваемое полем нулевых колебаний давление на пластину 2 составляет

$$P = P^{(23)} - P^{(12)}, \quad \text{где, например,} \quad (4.27b)$$

$$P^{(12)} = -\partial E_0 / \partial V = -(1/S_{xy}) \partial E_0 / \partial z \equiv -(1/S_{xy}) \partial E_0 / \partial \ell.$$

В действительности, при очень высоких частотах металл становится прозрачным, поля «сверху» и «снизу» пластины одинаковы, их воздействия на пластину в точности компенсируются. Чтобы описать это изменение, введем в описание давления излучения *регуляризующий множитель (регулятор)* $R(\omega)$, который ничего не портит при небольших частотах и убывает эффект при больших частотах (*это обычный прием при работе с «расходящимися» величинами*):

$$R(\omega) = \begin{cases} 1 & \text{при } \omega = 0, \\ 0 & \text{при } \omega \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (4.28)$$

$$R'(0) \sim \beta, \quad R^{(n)}(0) \sim \beta^n, \quad \beta \rightarrow 0.$$

Мы потребовали еще, чтобы производные регулятора в нуле были бы достаточно малы. В частности за регулятор можно взять функцию $R(\omega) = e^{-\beta\omega}$ с $\beta \rightarrow 0$.

Перейдем к вычислению сумм (4.27) для области 12. Заменяем суммирование по поперечным движениям на интегрирование и выполним интегрирование по углам:

$$\sum \Delta s_x \Delta s_y \rightarrow dk_x dk_y XY / \pi^2 \rightarrow S_{xy} dk_{\perp}^2 / 4\pi.$$

(Мы учли здесь, что интегрирование по углам в плоскости k_x, k_y дает только $\pi/2$, поскольку s_x и s_y положительны). С учетом суммирования по поляризациям это дает

$$E_0^{(12)} = \hbar S_{xy} \sum_s \int \frac{dk_{\perp}^2}{4\pi} \omega, \quad \omega = c \sqrt{k_{\perp}^2 + k_z^2}, \quad k_z = \frac{\pi s}{\ell}$$

Входящую в каждое слагаемое (4.27б) производную $\partial \omega / \partial \ell$ удобно записать в виде $\partial \omega / \partial \ell = -(1/\omega \ell) (\pi c s / \ell)^2$. Теперь давление, производимое полем нулевых колебаний из области 12 на пластину 2, принимает вид

$$P^{(12)} = -\hbar \sum_s \int \frac{dk_{\perp}^2}{4\pi} \cdot \frac{\partial \omega(k_{\perp}, s)}{\partial \ell} R(\omega) = \frac{\hbar}{4\pi \ell} \sum_s \left(\frac{\pi c s}{\ell} \right)^2 \int \frac{dk_{\perp}^2}{\pi \omega} R(\omega)$$

Выполним еще замену переменных $dk_{\perp}^2 = 2\omega d\omega/c^2$ и выполним сначала интегрирование по ω , заметив, что при данном s значение ω ограничено снизу, $\omega \geq u = c\pi s/\ell$. В итоге

$$P^{(12)} = \frac{\hbar}{2\pi\ell c^2} \sum_s f(s) \equiv \frac{\hbar}{2\pi^2 c^3} \sum_s f(s) \left(\frac{du}{ds} \right), \quad (4.29a)$$

$$f(s) = u^2 \int_u^{\infty} R(\omega) d\omega, \quad u = \frac{c\pi s}{\ell}.$$

Чтобы найти полученную сумму, удобно использовать формулу Эйлера–Маклорена (17.17), применяемую при численном вычислении интегралов:

$$\int_0^{\infty} f(x) dx = \frac{1}{2} f(0) + \sum_{s=1}^{\infty} f(s) + \frac{1}{12} f'(0) - \frac{1}{720} f^{(3)}(0) + \dots$$

Выразим отсюда сумму ряда через интеграл и производные $f(s)$ в нуле. Учитывая, что $f(0) = 0$, $f'(0) = 0$, $f^{(3)}(0) = -6(c\pi/\ell)^3 R(0) \equiv -6(c\pi/\ell)^3$, а все последующие производные пропорциональны дополнительным степеням β , найдем

$$P^{(12)} = \frac{\hbar}{2\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} f(u) du - \frac{\pi^2 \hbar c}{240 \ell^4} + \mathcal{O}(\beta^2),$$

$$P^{(23)} = \frac{\hbar}{2\pi^2 c^3} \int_0^{\infty} f(u) du - \frac{\pi^2 \hbar c}{240 L^4} + \mathcal{O}(\beta^2).$$

В этих выражениях «бесконечная» энергия нулевых колебаний неограниченного пространства содержится в интегральном слагаемом, одинаковом с обеих сторон пластины.

В давлении вакуума на вторую пластину

$$\Delta P = P^{(23)} - P^{(12)}$$

эти «бесконечности» сокращаются, и в пределе $\beta \rightarrow 0$ при $L \gg \ell$ мы получаем

$$\Delta P = \frac{\pi^2 \hbar c}{240 \ell^4}. \quad (4.29б)$$

Эту величину измеряли при температуре $T \ll \hbar c/\ell$, когда вертикальные колебания поля между пластинами 1 и 2 не возбуждаются. При $\ell \sim 1$ мкм была достигнута точность около 5%.

§ 4.4. Когерентные состояния

Предварительные соображения. Чтобы понять, зачем изучаются когерентные состояния, рассмотрим сначала **область фокусирования пучка** (света, электронов, нейтронов). Пусть пучок круглого сечения, движущийся вдоль оси z , фокусируется на плоском экране в пятно с радиусом a , т. е. выполняется соотношение $\Delta x = \Delta y = a$. Угловой разброс пучка характеризуется отношением $\Delta\theta = \Delta p_x/p_z = \Delta p_y/p_z$. В фокальной плоскости угловой разброс не зависит от пространственного разброса и от азимутального угла (т. е. фазовый объем пучка есть $\Delta x \Delta y \Delta p_x \Delta p_y$). Соответственно, квадрат радиуса пучка на расстоянии z от фокальной плоскости равен

сумме квадратов дисперсий двух независимых величин — фокального разброса собственно координаты и радиального разброса, вызванного угловым разбросом вылета частиц из фокальной плоскости:

$$(\Delta x(z))^2 = (\Delta x)^2 + \frac{(\Delta p_x)^2}{p_z^2} z^2 \equiv (\Delta x)^2 (1 + z^2/\beta^2).$$

Здесь $\beta = p_z \Delta x / \Delta p_x$ — расстояние от фокальной плоскости, на котором площадь фокального пятна увеличивается вдвое.

Пусть произведение дисперсий координаты и импульса есть $\Delta x \Delta p = A \hbar / 2$, т. е. соотношение неопределенностей выполняется «с запасом» A , причем $A \geq 1$. Тогда

$$\beta = 2(\Delta x)^2 / (\hbar A p_z) \equiv 4\pi(\Delta x)^2 / (A\lambda) \quad (\lambda = 2\pi\hbar/p_z).$$

Итак, область фокусирования имеет наибольшую протяженность, если достигается нижший предел в соотношении неопределенностей $A = 1$ (для света это — дифракционный предел), в частности если мы имеем дело с основным состоянием осциллятора электромагнитного поля (с наименьшей энергией $\hbar\omega/2$). Так, для длины волны 1 мкм (ближний инфракрасный свет, лазер на неодимовом стекле или гранате) и при $a = 0,3$ мкм в дифракционном пределе величина $\beta \approx 1$ мм. Если же мы имеем дело с n -м возбужденным состоянием осциллятора электромагнитного поля, то в силу (4.16) $A = 2n + 1$, длина области фокусирования β уменьшается в $(2n + 1)$ раз, и при больших энергиях вспышки становится исчезающе малой.

■ **Когерентные состояния.** К счастью, лазерные вспышки большой энергии обычно составляют *когерентную суперпозицию осцилляторов с различными n* с согласованными амплитудами и фазами так, что в этой вспышке произведение неопределенностей $\Delta x \Delta p$ близко к минимуму $\hbar/2$, обеспечивая оптимальное фокусирование. Это свойство лазерных вспышек обнаружил в 1963 г. Р. Глаубер (*Нобелевская премия по физике, 2005 г.*). Ясно, что такое удачное соотношение амплитуд и фаз разных возбуждений может реализоваться только, если фотоны испускаются источником света когерентно, и не может реализоваться для обычных тепловых источников света.

Такие **когерентные состояния** были рассмотрены еще в 1926 г. Э. Шредингером. Это — собственные состояния оператора уничтожения \hat{b} , определяемые уравнением

$$\hat{b}|\beta\rangle = \frac{\beta}{\sqrt{2}} |\beta\rangle, \quad \beta = \frac{Q}{x_0} + i \frac{P}{p_0}. \quad (4.30)$$

Здесь β — некоторое комплексное число, а Q и P пропорциональны его действительной и мнимой частям¹.

Решение уравнения (4.30) в координатном представлении получается из решения (4.19) для основного состояния простым сдвигом $\xi \rightarrow \xi - \beta$ (с изменением нормировки из-за комплексности β), т. е. $\psi(\xi) = \pi^{-1/4} \exp\{-[(\xi - \beta)^2 + \text{Im}(\beta)^2]/2\}$. В

¹Обратите внимание, что собственное значение β может быть произвольным комплексным числом. В этой задаче нет никаких дополнительных условий, которые вели бы к запрету некоторых значений β — «квантованию» собственных значений.

переменных x эта волновая функция имеет вид

$$\begin{aligned}\psi_{\beta}(x) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}\sqrt{x_0}} e^{\left[-\frac{(x-Q-iP/m\omega)^2}{2x_0^2} - \frac{P^2}{2p_0^2}\right]} \equiv \\ &\equiv \pi^{-1/4} x_0^{-1/2} e^{-(x-Q)^2/2x_0^2 - iP(x-Q)/\hbar}.\end{aligned}\quad (4.31)$$

В импульсном представлении волновая функция этого состояния имеет схожий вид.

Первая форма этой волновой функции показывает, что значения дисперсий Δx и Δp точно те же, что и для основного состояния и их произведение минимально, как и для основного состояния:

$$\Delta x = \frac{x_0}{\sqrt{2}}, \quad \Delta p = \frac{p_0}{\sqrt{2}} \Rightarrow \Delta x \Delta p = \hbar/2. \quad (4.32a)$$

Итак, когерентное состояние обеспечивает оптимальное фокусирование.

Вторая форма волновой функции (4.31) показывает, что когерентное состояние — волновой пакет с центром в точке Q и суммарным импульсом P . При этом

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle &= \langle x \rangle^2 + \Delta x^2 \equiv Q^2 + \Delta x^2 \\ \langle p^2 \rangle &= \langle p \rangle^2 + \Delta p^2 \equiv P^2 + \Delta p^2.\end{aligned}\quad (4.32b)$$

В частности, именно так описывается состояние иона в кристаллической решетке после мгновенного (с точки зрения атомных явлений) испускания ядром фотона умеренно большой энергии E_{γ} . В этом случае $Q = 0$ (атом не успел сдвинуться), а $P = E_{\gamma}/c$ (см. подробнее в § 8.7).

В когерентном состоянии средние значения координаты и импульса не могут оставаться постоянными, поскольку входящие в их определения стационарные состояния по-разному меняются со временем. Чтобы выяснить, как это происходит, можно воспользоваться гайзенберговскими уравнениями движения для операторов (??) в форме уравнений Эренфеста (3.8). Для гармонического осциллятора их решение имеет вид :

$$\begin{aligned}\hat{x}(t) &= \hat{x}(0) \cdot \cos(\omega t) + \hat{p}(0)/(m\omega) \cdot \sin(\omega t), \\ \hat{p}(t) &= \hat{p}(0) \cdot \cos(\omega t) - m\omega \hat{x}(0) \cdot \sin(\omega t).\end{aligned}$$

Зависимость средних значений P и Q от времени описывается усреднением этих уравнений:

$$Q(t) = Q \cos \omega t + \frac{P}{m\omega} \sin \omega t, \quad P(t) = P \cos \omega t - m\omega Q \sin \omega t. \quad (4.33)$$

Таким образом, центр тяжести рассматриваемого волнового пакета движется в точности так же, как классическая частица.

Соотношения (4.32) позволяют легко вычислить энергию соответствующего состояния

$$\begin{aligned}E = \langle \hat{H} \rangle &= \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2 \langle x^2 \rangle}{2} = \frac{P^2 + \Delta p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 (Q^2 + \Delta x^2)}{2} = \\ &= \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2 Q^2}{2} + \frac{\hbar\omega}{2} \equiv \hbar\omega \frac{|\beta|^2 + 1}{2}.\end{aligned}\quad (4.34)$$

Таким образом, энергия когерентного состояния может быть сколь угодно большой при том, что разбросы значений координаты и импульса остаются предельно малыми.

• Это оказалось возможным потому, что в когерентном состоянии $|\beta\rangle$ стационарные состояния $|n\rangle$ (4.11) складываются с совершенно определенными амплитудами и фазами, обеспечивающими компенсацию разбросов координат и импульсов возбужденных состояний.

Чтобы найти эти амплитуды и фазы, разложим когерентное состояние по стационарным состояниям $|k\rangle$:

$$|\beta\rangle = \sum_k d_k |k\rangle.$$

Умножим равенство (4.30) слева на $\langle n|$. Поскольку $\langle n|\hat{b} = \sqrt{n+1} \langle n+1|$ (4.11), то с учетом ортогональности состояний с разными n получается рекуррентное соотношение $\sqrt{n+1} d_{n+1} = \beta d_n / \sqrt{2}$. Итерируя (т. е. повторяя) это соотношение n раз, начиная с $n = 0$, найдем

$$d_n \equiv \langle n|\beta\rangle = \frac{\beta^n}{\sqrt{2^n n!}} d_0 \Rightarrow |\beta\rangle = e^{-|\beta|^2/4} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{\sqrt{2^n n!}} |n\rangle. \quad (4.35)$$

(Величина $d_0 = e^{-|\beta|^2/4}$ получается из условия нормировки.) Выражая $|n\rangle$ через $(\hat{b}^+)^n |0\rangle$ (4.11), находим

$$|\beta\rangle = e^{-|\beta|^2/4} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta \hat{b}^+)^n}{2^{n/2} n!} |0\rangle \equiv e^{-|\beta|^2/4} e^{(\beta \hat{b}^+ / \sqrt{2})} |0\rangle. \quad (4.36)$$

Таким образом, вероятность найти состояние $|n\rangle$ в данном когерентном состоянии $|\beta\rangle$ описывается распределением

$$\omega_n = \frac{|\beta|^{2n}}{2^n n!} e^{-|\beta|^2/2}. \quad (4.37)$$

Среднее значение числа «вирбронов» в этом состоянии есть $|\beta|^2/2$, а средняя энергия осциллятора естественно совпадает с (4.34):

$$E = \langle \beta | \hbar \omega \left(\hat{b}^+ \hat{b} + \frac{1}{2} \right) | \beta \rangle = \hbar \omega \left(\sum_n n \omega_n + \frac{1}{2} \right) = \hbar \omega \frac{|\beta|^2 + 1}{2}.$$

• Поучительно рассмотреть и другой вывод уравнений для эволюции средних значений координаты и времени (4.33), основанный на законе эволюции состояния $|n\rangle$, который имеет вид $|n\rangle e^{-iEt/\hbar} \equiv |n\rangle e^{-it\omega n - it\omega/2}$. В итоге

$$e^{|\beta|^2/2} |\beta(t)\rangle = \sum_n \frac{\beta^n}{\sqrt{2^n n!}} e^{-i\omega n t - i\omega t/2} |n\rangle \equiv e^{-i\omega t/2} \sum_n \frac{(\beta e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{2^n n!}} |n\rangle. \quad (4.38)$$

Итак, эволюция состояния со временем описывается заменой

$$\beta \rightarrow \beta(t) = \beta e^{-i\omega t}.$$

Вспоминая теперь связь $\beta(t)$ с координатой центра тяжести и импульсом пакета (4.30), вновь убедимся в справедливости (4.33).

Векторы разных когерентных состояний не ортогональны друг другу, но их набор является полным (даже избыточным) (см. задачу 4.17).

§ 4.5. Задачи

1. Найти волновые функции осциллятора в импульсном представлении.
2. Сравнить классическую $d\omega/dx$ и квантовую $|\psi_n(x)|^2$ плотности вероятности для осциллятора при $n = 0$ и $n \gg 1$. Найти вероятность того, что в основном состоянии осциллятора имеет $|x| \ll l$, $|p| \ll k$.
3. Построить матрицы операторов \hat{x}^2 и \hat{p}^2 в энергетическом представлении.
4. Найти средние значения $\langle n|\hat{x}\hat{p}|n\rangle$. Построить матрицу $\langle m|\hat{x}\hat{p}|n\rangle$.
5. Найти перестановочные соотношения операторов кинетической энергии гармонического осциллятора, взятых в разные моменты времени. Записать соответствующее соотношение неопределенностей. Разобрать случаи собственных состояний осциллятора и их суперпозиции.

6. Найти уровни энергии и волновые функции для частицы в поле

$$U(x) = \begin{cases} m\omega^2 x^2/2 & \text{при } x > 0, \\ \infty & \text{при } x < 0. \end{cases}$$

7. Частица находится в поле $U = m\omega^2 x^2/2$ в состоянии, описываемом волновой функцией $\psi(x) = \pi^{-1/4} b^{-1/2} e^{-x^2/(2b^2)}$. Определить вероятности того, что при измерении энергии будут найдены значения $\hbar\omega/2$ и $3\hbar\omega/2$.
8. Докажите, что $[\hat{b}, f(\hat{b}^+)] = df(\hat{b}^+)/d\hat{b}^+$ и в частности $[\hat{b}, (\hat{b}^+)^n] = n(\hat{b}^+)^{n-1}$. Вычислите $[\hat{b}^2, (\hat{b}^+)^n]$.
9. Найти перестановочные соотношения для операторов

$$\hat{A}_1 = (\hat{b}^+\hat{b}^+ + \hat{b}\hat{b})/4, \quad \hat{A}_2 = (\hat{b}^+\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^+)/4$$

$$\hat{A}_3 = i(\hat{b}^+\hat{b}^+ - \hat{b}\hat{b})/4.$$
10. Найти собственные значения оператора $\hat{b}^+\hat{b} + \lambda\hat{b}^+ + \lambda^*\hat{b}$.
11. Покажите, что оператор $e^{2i\pi\hat{b}^+\hat{b}}$ эквивалентен единичному.
12. Начальное состояние частицы, помещенной в поле $U = m\omega^2 x^2/2$, описывается волновой функцией $\psi(x, 0) = \sqrt{2a^3}/[(x^2 + a^2)\sqrt{\pi}]$, причем $a^2 \ll \hbar/(m\omega)$. Найти вероятность того, что ее энергия равна $\hbar\omega/2$, $3\hbar\omega/2$.
13. Начальное состояние частицы, помещенной в поле $U = m\omega^2 x^2/2$, описывается волновой функцией $\psi(x, 0) = Nx(1-x)$. Найти среднее значение ее координаты $\langle x(t) \rangle$ в зависимости от времени.
14. Частица находится в основном состоянии в поле

$$U(x) = \begin{cases} m\omega^2 x^2/2 & \text{при } x > 0, \\ \infty & \text{при } x < 0. \end{cases}$$

В момент времени $t = 0$ поле принимает форму симметричного осциллятора $U(x) = m\omega^2 x^2/2$ («перегородка взрывается»). Каковы вероятности того, что частица окажется в состояниях с $n = 0$, 1 или 2? Описать зависимость волновой функции от времени после «взрыва», ограничившись учетом только перечисленных состояний.

15. При целых n уровни энергии двумерного осциллятора

$\hat{H} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2)$ вырождены. В соответствии с (2.12) это означает, что существует еще два сохраняющихся оператора, не коммутирующих друг

с другом. Покажите, что такими свойствами обладают операторы $\hat{A}_1^{(n)} = \hat{b}_x^n \hat{b}_y^+$ и $\hat{A}_2^{(n)} = \hat{b}_x^+ \hat{b}_y^n$. Убедитесь, что эти операторы коммутируют с гамильтонианом прямым коммутированием и действием на собственные состояния гамильтониана. Найдите коммутатор $[\hat{A}_1^{(n)}, \hat{A}_2^{(n)}]$.

16. Постройте волновую функцию когерентного состояния $|\beta\rangle$ в импульсном представлении.
17. Докажите, что набор когерентных состояний полон, т. е.

$$\frac{1}{\pi} \int d(\operatorname{Re} \beta) d(\operatorname{Im} \beta) |\beta\rangle \langle \beta| = \hat{1}.$$

Глава 5

ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ

В этой главе мы опишем обычно используемые методы приближенного решения задач квантовой механики, которые работают при решении самых разных физических задач. Мы ограничимся здесь задачами, в которых гамильтониан не зависит от времени явно. При этом проблема состоит в том, чтобы найти приближенные значения уровней энергии и волновые функции.

Идея всех приближенных методов состоит в использовании того факта, что «рядом» с нашей задачей есть точно решаемая задача, и следует искать поправки к решениям этой точно решаемой задачи. Методы различаются идеей выбора этой «соседней» задачи.

Помимо того, рассматриваемые методы различаются по «степени регулярности». В некоторых из них построение последующих приближений — задача той же принципиальной сложности, что и для первого приближения. Отличие состоит лишь в степени громоздкости приближений (теория возмущений). В других случаях следующие приближения по существу сложнее первых, иногда надо включать новые идеи (надбарьерное отражение в квазиклассическом методе). (К сожалению, почти всегда получающиеся ряды — *асимптотические*. Хорошее приближение дают только несколько первых членов этих рядов.) Наконец, нередко регулярный метод для построения последующих приближений, по меньшей мере, трудно предложить (вариационный метод).

§ 5.1. Вариационный метод

• Собственные функции гамильтониана \hat{H} образуют полную систему $\psi_n(x)$ (с собственными значениями E_n). Это значит, что для любой нормированной функции $\psi(x) = \sum a_n \psi_n(x)$ и $\sum |a_n|^2 = 1$. образуем теперь величину

$$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \equiv \int \psi^* \hat{H} \psi dx.$$

В силу уравнения Шредингера, $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum |a_n|^2 E_n \geq E_0$. Поэтому имеет место **вариационный принцип**:

$$E_0 = \min \left\{ \int \psi^* \hat{H} \psi dx \right\} \quad \text{при условии} \quad \int \psi^* \psi dx = 1. \quad (5.1)$$

Волновая функция основного состояния ψ_0 получается из условия минимума (5.1) в пространстве всех гладких функций. Волновая функция ψ_1 первого возбужденного состояния получается из того же условия в пространстве гладких функций, ортогональных к ψ_0 . Следующие волновые функции находятся подобным же образом.

■ **Вариационный метод** состоит в использовании условия (5.1) для приближенного вычисления волновых функций и энергий различных систем. Для этого угадывают более или менее правдоподобную форму волновой функции в зависимости от каких-нибудь параметров β — *пробную функцию*. Тогда (5.1) становится простой задачей на нахождение минимума $E(\beta)$. Найденное таким способом значение энергии основного состояния E_0 лежит, конечно, не ниже истинного.

◇ Чтобы найти первое возбужденное состояние, угадывают волновую функцию, ортогональную к найденной функции основного состояния и зависящую от другого параметра β_1 . Затем повторяется описанная выше процедура. Разумеется, качество описания для возбужденного состояния хуже, чем для основного, поскольку в основе лежит найденное неточное описание основного состояния. Таким образом, вариационный метод позволяет надежно определить лишь несколько первых уровней.

▽ Выше мы получали оценки для уровней энергии в простых потенциалах на основе соотношения неопределенностей. Применявшийся подход был в сущности упрощенной версией вариационного метода.

◆ На практике вариационный метод используют, например, при описании сложных многоэлектронных систем. В качестве исходной волновой функции берут должным образом симметризованную суперпозицию волновых функций отдельных электронов в усредненном поле остальных электронов и ядер. Параметры этого (*самосогласованного*) поля и подлежат определению.

▼ *Пример:* рассмотрим поле $U = -G\delta(x)$ и воспользуемся (нормированной) пробной функцией вида

$$\psi_b = \pi^{-1/4} b^{-1/2} \exp(-x^2/2b^2).$$

Вычислим среднее значение энергии с этой функцией:

$$E(b) = \int dx \psi_b^* \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) - G\delta(x) \right] \psi_b = \frac{\hbar^2}{4mb^2} - \frac{G}{b\sqrt{\pi}}.$$

Далее найдем минимум этого выражения по b :

$$E_{min} = -\frac{mG^2}{\pi\hbar^2} \quad \text{при} \quad b_{min} = \frac{\hbar^2\sqrt{\pi}}{2mG}.$$

Сравните эти выражения с точным решением (задача 2.10).

§ 5.2. Теория возмущений

Пусть гамильтониан \hat{H} изучаемой физической задачи мало отличается от гамильтониана \hat{H}_0 , чьи собственные состояния $|n\rangle_0$ и энергии $E_n^{(0)}$ известны, т. е.

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V, \quad \hat{H}_0|n\rangle_0 = E_n^{(0)}. \quad (5.2)$$

Без потери общности можно считать набор собственных векторов $|n\rangle_0$ ортонормированным, ${}_0\langle m|n\rangle_0 = \delta_{mn}$. Гамильтониан \hat{H}_0 называют невозмущенным, а V — *возмущением*. Что такое *мало*, выяснится немного позднее.

Решение уравнения Шредингера в виде ряда по возмущению V составляет содержание **теории возмущений**.

Итак, мы ищем решение уравнения Шредингера

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle : \quad \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \hat{H}_0|n\rangle_0 = E_n^{(0)}|n\rangle_0. \quad (5.3)$$

При этом полезно записывать оператор возмущения \hat{V} в представлении собственных векторов невозмущенного гамильтониана, т. е. в виде матрицы

$$V_{mn} = {}_0\langle m|\hat{V}|n\rangle_0 \equiv V_{nm}^*. \quad (5.4)$$

Для удобства и чтобы подчеркнуть малость возмущения V , мы будем писать ниже ϵV вместо V и вести расчет так, будто бы $\epsilon \rightarrow 0$. На самом деле в конце мы положим $\epsilon = 1$.

Разложим решения уравнения (5.3) $|n\rangle$ по собственным функциям $|m\rangle_0$ невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 , а затем разложим в ряд по ϵ энергии E_n и коэффициенты разложения $|n\rangle$ по $|m\rangle_0$:

$$\begin{aligned} |n\rangle &= \sum_m c_{nm} |m\rangle_0, \quad c_{nm} = c_{nm}^0 + \epsilon c_{nm}^1 + \epsilon^2 c_{nm}^2 + \dots, \\ E_n &= E_n^{(0)} + \epsilon E_n^{(1)} + \epsilon^2 E_n^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (5.5)$$

Тогда уравнение (5.3) примет вид

$$\begin{aligned} &\sum_m (\hat{H}_0 + \epsilon \hat{V})(c_{nm}^0 + \epsilon c_{nm}^1 + \epsilon^2 c_{nm}^2 + \dots) |m\rangle_0 = \\ &= \sum_m (E_n^{(0)} + \epsilon E_n^{(1)} + \epsilon^2 E_n^{(2)} + \dots) \otimes (c_{nm}^0 + \epsilon c_{nm}^1 + \epsilon^2 c_{nm}^2 + \dots) |m\rangle_0. \end{aligned}$$

Умножим это уравнение скалярно слева на ${}_0\langle k|$. С учетом ортонормированности базиса $|n\rangle_0$, т. е. ${}_0\langle k|m\rangle_0 = \delta_{km}$, и определения (5.4) мы получим:

$$\begin{aligned} &\sum_m (E_k^{(0)} \delta_{km} + \epsilon V_{km})(c_{nm}^0 + \epsilon c_{nm}^1 + \epsilon^2 c_{nm}^2 + \dots) = \\ &= (E_n^{(0)} + \epsilon E_n^{(1)} + \epsilon^2 E_n^{(2)} + \dots) \cdot (c_{nk}^0 + \epsilon c_{nk}^1 + \epsilon^2 c_{nk}^2 + \dots). \end{aligned} \quad (5.6)$$

Далее приравниваются выражения при одной степени ϵ . Детали решения различаются в зависимости от того, является ли исходная невозмущенная система состояний $|n\rangle_0$ вырожденной (т. е. энергии некоторых состояний совпадают) или невырожденной.

5.2.1. Невырожденный случай

Мы начнем с технически простейшего случая, когда вырождения нет, $E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$.

▼ Нулевое приближение получается из (5.6) при $\epsilon \rightarrow 0$. При этом уравнение (5.6) принимает вид $(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})c_{nk}^0 = 0$. Его решение есть $c_{nk}^0 = \delta_{nk}$.

▼ Первое приближение получается, если приравнять выражения при первой степени ϵ в (5.6). При $k = n$ остаются два слагаемых и получается $E_n^{(1)} = V_{nn}$. При $k \neq n$ получается уравнение

$$V_{kn} + (E_n^{(0)} - E_k^{(0)})c_{nk}^1 = 0 \Rightarrow c_{nk}^1 = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad E_n^{(1)} = V_{nn}. \quad (5.7)$$

При этом коэффициент c_{nn}^1 не определяется¹. Обычно его фиксируют условием сохранения нормы возмущенного вектора состояния, $c_{nn}^1 = 0$.

▼ Второе приближение получается, если приравнять выражения при второй степени ϵ в (5.6). При $k = n$ оно дает

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn}V_{nm}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \equiv \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (5.8)$$

В частности, поправка второго порядка к энергии основного состояния всегда отрицательна.

Запишем теперь найденные решения, положив в них $\epsilon = 1$:

$$c_{nm} = \delta_{nm} + \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots; \quad E_n = E_n^{(0)} + V_{nn} + \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots \quad (5.9)$$

Критерий применимости. Чтобы теория возмущений работала хорошо, вектор $|n\rangle$ должен лишь немного отличаться от вектора $|n\rangle_0$, и поправки к энергиям уровней должны быть меньше расстояния между уровнями, т. е. должно быть

$$|V_{mn}| \ll |E_m^0 - E_n^0|. \quad (5.10)$$

◆ *Пример.* Вычислите в первом неисчезающем приближении поправки к энергии гармонического осциллятора в полях:

а) $V = ax$; б) $V = bx^2/2$.

Сравните с точными решениями.

5.2.2. Производная от энергии по параметру

Пусть $\hat{H} = \hat{H}(\lambda)$ — непрерывная функция параметра λ . Тогда

$$\hat{H}(\lambda + \Delta\lambda) \equiv \hat{H}_0 + \hat{V} \rightarrow \hat{V} = \Delta\lambda \partial \hat{H} / \partial \lambda.$$

¹В промежуточных вычислениях можно выбрать любое удобное значение c_{nn} и использовать независимость физических результатов от этой неоднозначности (*ренормализационная инвариантность*). Подобный прием оказался очень плодотворным при изучении задач физики элементарных частиц и конденсированного состояния.

Поправка к энергии $E_n^1 = V_{nn} \equiv \langle n | \Delta \lambda \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | n \rangle$. С другой стороны, эта величина $E_n^1 = \Delta \lambda (\partial E_n / \partial \lambda)$, поэтому

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \langle n | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | n \rangle. \quad (5.11)$$

5.2.3. Теория возмущений при наличии вырождения

Вырождение означает, что по крайней мере одному собственному значению E_n^0 соответствует $s > 1$ (ортогональных) собственных векторов. В этом случае при попытке воспользоваться полученными выше результатами некоторые из знаменателей (5.9) обратятся в нуль. Это не опасно в тех случаях, когда возмущение не снимает вырождения, т. е. если равны нулю и соответствующие матричные элементы в числителях. В общем случае это не так. Надо научиться исключать это деление на ноль.

Рассмотрим нашу группу из s собственных векторов, отвечающих вырожденному собственному значению энергии E_n^0 . Для их обозначения введем на время двойную нумерацию $|nj\rangle$, $j = 1, \dots, s$. Эти функции образуют ортонормированный базис в s -мерном подпространстве всего гильбертова пространства состояний, которое мы называем C_s . Любой вектор C_s является собственным вектором невозмущенного гамильтониана с одним и тем же собственным значением E_n^0 . Это справедливо и для любой линейной комбинации векторов $|nj\rangle$,

$$\hat{H}_0 |\tilde{n}\alpha\rangle = E_n^0 |\tilde{n}\alpha\rangle \quad \text{при} \quad |\tilde{n}\alpha\rangle = \sum_j c_{\alpha j}^0 |nj\rangle.$$

Проблема деления на ноль исчезает в таком базисе $|\tilde{n}\alpha\rangle$, в котором все недиагональные матричные элементы возмущения обращаются в нуль (базис, в котором матрица возмущения $V_{n\alpha, n\beta} \equiv V_{\alpha\beta}$ диагональна). Это замечание *сводит нашу задачу к поиску такого базиса*.

▼ **Простой пример** дает плоский осциллятор $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2(x^2 + y^2)}{2}$.

Этот гамильтониан обладает симметрией относительно вращений в плоскости (x, y) . Энергии его уровней — суммы энергий независимых осцилляторов по осям x и y :

$$E_n^{(0)} = \hbar\omega(n_x + 1/2 + n_y + 1/2) \equiv \hbar\omega(n + 1).$$

При этом собственные векторы $|nj\rangle \equiv |n_x\rangle|n_y\rangle$ и $n = n_x + n_y$.

Состояние с данным значением n вырождено $(n + 1)$ -кратно (это — число способов, которыми данное значение n можно составить из целых чисел n_x и n_y). Так, собственные векторы состояния с $n = 3$ — это $|i_1\rangle = |0\rangle|3\rangle$, $|i_2\rangle = |1\rangle|2\rangle$, $|i_3\rangle = |2\rangle|1\rangle$, $|i_4\rangle = |3\rangle|0\rangle$. Они и образуют невозмущенный базис пространства $C_s \equiv C_4$.

Рассмотрим разные возмущения в C_4 .

▼ Возмущение $V = b(x^2 + y^2)^2$ не нарушает исходной симметрии. Матрица возмущения диагональна и пропорциональна единичной. Недиагональные элементы отсутствуют, проблемы деления на ноль не возникает. Возмущение не разрушает симметрию.

▼ Возмущение $V = bx^2$ нарушает симметрию. Оно «направлено» вдоль одной из первоначально выбранных осей. Матрица возмущения диагональна, но не пропорциональна единичной — $bx_0^2/2 \cdot \text{diag}(7, 5, 3, 1)$. Недиагональные элементы отсутствуют, проблемы деления на ноль не возникает.

▼ Возмущение $V = b(x+y)^2/2$ получается из предыдущего при повороте осей на 45° , поэтому и результат здесь должен совпадать с предыдущим. Однако при нашем выборе осей матрица возмущения уже недиагональна. Она имеет вид:

$$\frac{bx_0^2}{4} \begin{pmatrix} 8 & 2\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 2\sqrt{3} & 8 & 4 & 0 \\ 0 & 4 & 8 & 2\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 2\sqrt{3} & 8 \end{pmatrix}.$$

Диагонализация этой матрицы дает, как и следовало ожидать, те же собственные значения, что и в предыдущем случае. Новые собственные векторы получаются из старых вращением осей на 45° . После этой диагонализации проблема деления на ноль исчезла, и задача свелась к предыдущей.

◆ Обычно вырождение возникает в силу наличия какой-то симметрии невозмущенного гамильтониана (в нашем случае — относительно вращений в плоскости x, y). Если возмущение обладает той же симметрией, его недиагональные матричные элементы по состояниям, принадлежащим вырожденному уровню, — нули (а все диагональные совпадают), и проблемы не возникает. Если же возмущение не обладает этой симметрией, т. е. *полный гамильтониан описывает систему с нарушенной симметрией*, то при неудачном выборе исходного базиса недиагональные матричные элементы возмущения — не нули. Задача состоит в выборе базиса, диагонализующего возмущение в каждом из подпространств, принадлежащих данному невозмущенному значению энергии.

Обсуждаемый ниже метод решения не зависит от того, является ли вырождение случайным или оно связано с какой-то симметрией невозмущенного гамильтониана.

■ **Общее решение.** Рассмотрим в уравнении (5.6) в качестве состояния $|k\rangle_0$ одно из состояний $|ni\rangle_0$. Тогда в нулевом порядке по ϵ получается тождество $E_n^{(0)} = E_n^{(0)}$ и не возникает уравнений для $c_{nj,ni}^0$. (Если взять в качестве состояния $|k\rangle_0$ любое из состояний $|ma\rangle_0$ с $E_m^0 \neq E_n^0$, то немедленно получается $c_{nj,ma} = 0$.) Система уравнений для $c_{nj,ni}^0$ получается в первом порядке по ϵ :

$$\sum (V_{ij} - E_{n\alpha}^{(1)}\delta_{ij})c_{n\alpha,nj}^0 = 0. \quad (5.12)$$

Решения этой системы однородных уравнений для коэффициентов $c_{\alpha j}^0$ — не нули, только если обращается в ноль определитель, составленный из коэффициентов при неизвестных:

$$\det |V_{ij} - E_{n\alpha}^{(1)}\delta_{ij}| = 0. \quad (5.13)$$

Это уравнение называют секулярным. Оно имеет s корней $E_{n\alpha}^1$ — собственных значений оператора \hat{V} (матрицы V_{ij}) — первых поправок к значению энергии вы-

рожденного уровня. Поэтому, в частности,

$$\sum_{\alpha=1}^s E_{n\alpha}^1 = \sum V_{ii} \quad (\equiv \text{Tr}(V)).$$

При каждом из собственных значений $E_{n\alpha}^1$ система (5.12) позволяет выразить $s-1$ коэффициент $c_{\alpha j}$ через один из них. С учетом условия нормировки определяются все эти коэффициенты, т. е. «повернутые» собственные векторы задачи.

Дальнейшие поправки отыскиваются так же, как и в невырожденном случае.

◆ Пример. Для **двухуровневой системы** ($s = 2$) обозначим $U = V_{11} - V_{22}$. Тогда секулярное уравнение принимает вид

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \quad (5.14)$$

$$\Rightarrow E_{\pm}^{(1)} = \frac{V_{11} + V_{22} \pm \Delta E}{2}, \quad \Delta E = \sqrt{U^2 + 4|V_{12}|^2}.$$

Соответствующие волновые функции $|+\rangle$ и $|-\rangle$ имеют вид

$$|+\rangle = c_{1+}|1\rangle + c_{2+}|2\rangle, \quad |-\rangle = c_{1-}|1\rangle + c_{2-}|2\rangle;$$

$$c_{1+} = -c_{2-} = \sqrt{\frac{\Delta E + U}{2\Delta E}}, \quad c_{2+} = c_{1-} = \sqrt{\frac{\Delta E - U}{2\Delta E}}.$$

5.2.4. Системы с близко расположенными уровнями

Рассмотрим теперь «близкие к вырождению» системы, где состояния разбиваются на группы с близко расположенными уровнями, а энергетические расстояния между группами достаточно велики. (*Часто это системы со слабо нарушенной симметрией.*) При этом в ряду теории возмущений появляются слагаемые с малыми знаменателями, сходимость ряда ухудшается.

Ситуация улучшится, если ввести «гамильтониан асимметрии» $\Delta\hat{H}$, собственными значениями которого являются отклонения невозмущенных энергий в группе от какого-то среднего значения. После этого можно воспользоваться методом, изложенным выше, и рассмотреть задачу о диагонализации «гамильтониана» $\Delta\hat{H} + V$ на подпространстве C_s .

Итак, обозначим через ϵ_i невозмущенные энергии состояний группы. Повторяя выкладки случая с вырождением для каждой из этих групп, мы приходим к уравнениям вида (5.12), (5.13) с заменой

$$V_{ij} - E_{n\alpha}^1 \delta_{ij} \Rightarrow V_{ij} - (E_{n\alpha}^1 + \epsilon_i) \delta_{ij}. \quad (5.15)$$

Окончательный ответ имеет тот же вид, что и в случае вырождения, с заменой $V_{ii} \rightarrow \tilde{V}_{ii} = V_{ii} + \epsilon_i$.

В частности, для двухуровневой системы секулярное уравнение легко получается из (5.14),

$$\begin{vmatrix} V_{11} + \varepsilon_1 - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} + \varepsilon_2 - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (5.16)$$

Полезно заметить, что при $|V_{12}| \ll |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|$ отсюда, как и следовало ожидать, получаются формулы обычной теории возмущений без вырождения (с точностью до второго порядка):

$$E_+^{(1)} = \varepsilon_1 + V_{11} + \frac{|V_{12}|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}, \quad E_-^{(1)} = \varepsilon_2 + V_{22} + \frac{|V_{12}|^2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1}.$$

▽ Рассмотрим, как меняются положения получившихся уровней с изменением возмущения. Будем описывать это изменение параметром ξ . Пусть при некотором $\xi = \xi_0$ оказывается $\tilde{V}_{11} = \tilde{V}_{22}$. Тогда — на первый взгляд — при переходе от $\xi > \xi_0$ к $\xi < \xi_0$ уровни E_+ и E_- поменяются местами: тот из них, который был выше, станет ниже, и наоборот — произойдет пересечение уровней. На самом деле, это не так. Для действительного пересечения уровней, когда они в точности совпали бы, требуется, чтобы в (5.14) было $\Delta E = 0$. Для этого недостаточно условия $\tilde{V}_{11}(\xi) = \tilde{V}_{22}(\xi)$, необходимо еще, чтобы было $V_{12}(\xi) = 0$. Это — два разных уравнения для одной величины ξ , обычно их одновременное решение отсутствует (если при этом не восстанавливается старая симметрия или не появляется новая). *Пересечение уровней — очень редкое событие в природе.*

§ 5.3. Квазиклассический случай

Еще один формально последовательный метод приближенного решения квантовомеханических задач работает в случаях, когда потенциал — плавная функция координаты так, что *почти всюду* де-бройлевская длина волны λ мала по сравнению с масштабом изменения потенциала d и меняется с координатой медленно (грубо говоря, параметр малости — λ/d). Это близко к картине приближения лучей в классической оптике, которое, в свою очередь, допускает описание, подобное классической механике. Именно это соответствие и является стартовой точкой метода.

Здесь сначала строится классическое описание, а затем отыскиваются квантовые поправки. Формально этот — *квазиклассический* — случай (приближение Венцеля–Крамерса–Бриллюена — ВКБ) отвечает пределу¹ $\hbar \rightarrow 0$. Интерес к этому случаю подкрепляется тем, что в соответствующих задачах хорошо представление о результате получается с помощью классической аналогии.

Фактически тот же самый метод применялся для описания распространения гидродинамических и электромагнитных волн в слоистых средах, колебаний мембран, аэродинамики движущегося снаряда и в ряде других задач, зачастую задолго до создания квантовой механики.

¹Разумеется, разложение по размерному параметру строго говоря не имеет смысла, ниже мы найдем соответствующий безразмерный параметр.

Простой анализ рассматриваемым методом допускает случай, когда переменные разделяются так, что интересующее нас движение можно рассматривать как одномерное. Обобщение на трехмерные задачи в общем случае невозможно. Мы разберем ниже только одномерное движение.

Терминология. При обсуждении квазиклассического приближения мы используем терминологию соответствующей классической задачи (см. рис. 5.1). Так, область, где полная энергия больше потенциальной, $E > U(x)$, (между точками А и С) — *область классического движения*. Область, где полная энергия меньше потенциальной, $E < U(x)$ (левее А и правее С), — *классически недоступная область*. Точки (А и С), где $E = U(x)$, — *точки поворота* (в этих точках классическая частица, двигавшаяся внутри ямы, меняет направление своего движения, натолкнувшись на «борт» ямы).

Далее вводятся зависящие от координат величины — импульс $p(x)$, волновое число $k(x) = p(x)/\hbar$ и длина волны $\lambda(x)$, а также *длина затухания* $1/\varkappa(x)$:

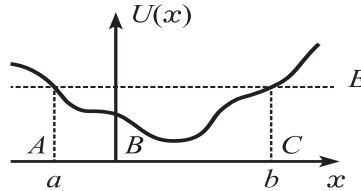


Рис. 5.1. Типичная квазиклассическая яма

$$k(x) = \frac{\sqrt{2m(E - U(x))}}{\hbar}, \quad \lambda(x) = \frac{2\pi}{k(x)} \quad \text{при } E > U(x),$$

$$\varkappa(x) = \frac{\sqrt{2m(U(x) - E)}}{\hbar} \quad \text{при } E < U(x).$$
(5.17)

5.3.1. Волновая функция. Условие применимости приближения

Потенциал $V(x)$ является обычно аналитической функцией **комплексной переменной** x за исключением некоторых точек особенностей $x = X_k$ (обычно расположенных вне действительной оси). Поэтому и решение уравнения Шредингера — обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка — аналитично во всей комплексной x -плоскости, за исключением может быть точек X_k и бесконечности. Обсуждаемые ниже квазиклассические решения уравнения Шредингера представляют собой асимптотики истинной волновой функции при большом значении величины $|\int k(x)dx|$.

Запишем волновую функцию в виде

$$\psi(x) = e^{iS(x)/\hbar} \quad (5.18a)$$

и разложим функцию $S(x)$ в ряд по степеням \hbar :

$$S = S_0 + (\hbar/i)S_1 + (\hbar/i)^2S_2 + \dots \quad (5.18б)$$

Это — формальное разложение по размерной константе, однако его использование дает разумный результат. Если определить величину d как размер, на котором существенно меняется потенциал, то можно сказать, что параметром разложения

является величина $1/kd \sim (\lambda/d)$. Более аккуратная оценка области применимости приближения, даваемого первыми членами ряда, (5.21) обсуждается ниже.

Подстановка в уравнение Шредингера $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$ дает уравнение (типа Рикатти):

$$(S'(x))^2/(2m) + U(x) - E - i\hbar S''(x)/(2m) = 0$$

Приравнивая члены с одинаковыми степенями \hbar , получим уравнения:

$$\frac{1}{2m}(S'_0(x))^2 = E - U(x), \quad S''_{n-1} = 2 \sum_{\nu=0}^n S'_\nu S'_{n-\nu} \quad (n \geq 1). \quad (5.18в)$$

Первое из этих уравнений легко решается:

$$S_0(x) = \pm \int p(x) dx. \quad (5.19а)$$

(Оно совпадает с известным в аналитической механике уравнением Гамильтона–Якоби для *укороченного действия* $S_0(x)$ как функции координат.)

Второе уравнение (5.18в) при $n = 1$ дает $S'_1 = -S''_0/2S'_0 \equiv -p'(x)/2p(x)$, т. е.

$$S_1 = -(1/2) \ln(S'_0) = -(1/2) \ln |p(x)|.$$

Ряд (5.18б) почти во всех случаях — асимптотический, и смысл имеют только несколько первых членов этого ряда. Обычно удерживают только первые два члена этого ряда, при этом

$$S(x) = \int \left(\pm p(x) - \frac{\hbar}{2i} \frac{p'(x)}{p(x)} \right) dx. \quad (5.19б)$$

Следующий (обычно не используемый) член квазиклассического ряда получается из уравнения (5.18в) при $n = 2$: $S'_2 = \mp(1/4) [p''/p^2 - 3p'^2/2p^3]$.

В итоге, в обозначениях (5.17) волновая функция имеет вид, подобный плоской волне, нормированной на поток (2.7б):

$$\psi(x) = \begin{cases} C_1 \psi_{+k} + C_2 \psi_{-k}, & \psi_{\pm k} = \frac{e^{\pm i\alpha}}{\sqrt{k(x)}} \text{ при } E > U(x); \\ D_1 \psi_{+\varkappa} + D_2 \psi_{-\varkappa}, & \psi_{\pm \varkappa} = \frac{e^{\pm \beta}}{\sqrt{\varkappa(x)}} \text{ при } E < U(x); \end{cases} \quad (5.20)$$

$$\alpha = \int_{x_0}^x k(x) dx, \quad \beta = \int_{x_0}^x \varkappa(x) dx.$$

Нормировка фиксируется условиями задачи, а за предел интегрирования x_0 в интегралах α , β обычно выбирают одну из точек поворота.

Полученные выражения являются асимптотиками решений точного уравнения Шредингера при больших значениях $|\alpha|$, $|\beta|$. Точное соотношение между коэффициентами C_i , D_i определяется граничными условиями. Для «волновых» решений

$\psi_{\pm k}$ в классически достижимой области выписанная суперпозиция несомненно имеет смысл. Для решений в классически недостижимой области (вторая строка (5.20)) это не совсем так. Одно из решений ψ_{+x} , ψ_{-x} экспоненциально велико, а другое экспоненциально мало. Погрешности приближения, дающие большую асимптотику, значительно больше малого асимптотического слагаемого. Учет экспоненциально малого слагаемого при наличии экспоненциально большого вклада — за пределами погрешности приближения. Не существует способа восстановить коэффициент при малой асимптотике по результатам какого-нибудь измерения волновой функции, если реализуется большая асимптотика¹. Тем не менее, в ряде задач использование независимости определителя Вронского от координат позволяет уследить и за коэффициентом при малой экспоненте.

Условия применимости приближения. Чтобы квазиклассическое приближение было применимо, классическое действие S_0 во всяком случае должно быть велико по сравнению с квантом действия

$$\int p(x)dx/\hbar \gg 1. \quad (5.21a)$$

Однако этого недостаточно. Наше приближение оправдано, если поправка мала по сравнению с главным членом, т. е. при $\hbar|S_1(x)| \ll |S_0(x)|$. Разумеется, надо рассматривать только зависящую от координат часть, поэтому аккуратнее записать это неравенство для производных: $\hbar|S'_1(x)| \ll |S'_0(x)|$. Подставляя сюда найденные выше выражения, получаем неравенство, определяющее применимость приближения в виде $|\hbar S''_0| \ll (S'_0(x))^2$. Отсюда прямым вычислением получаются две формы условия применимости приближения:

$$\left| \frac{m\hbar(dU/dx)}{p(x)^3} \right| \ll 1 \Rightarrow \frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| \ll 1. \quad (5.21b)$$

Последнее неравенство означает попросту, что введенные локальные величины (5.17) физически осмысленны, в частности, что длина волны лишь немного меняется на расстоянии $\lambda(x)$, это изменение $= \lambda d\lambda/dx$ много меньше самой длины волны $\lambda(x)$. Чтобы найти более точную оценку погрешности следует рассмотреть последующие члены квазиклассического разложения, см. например [1, 2].

∇ Для многих оценок фактическим параметром малости приближения является величина $(1/\pi n)^2$, где n — число узлов (нулей) волновой функции. Это — малое число для всех n , поэтому квазиклассическое решение нередко дает разумный ответ даже для основного состояния.

5.3.2. Правила квантования Бора–Зоммерфельда. I.

Пусть частица движется в поле потенциальной ямы вида рис. 5.1. Рассмотрим волновую функцию в плоскости комплексной переменной $x = x_r + iy$ при не очень

¹Подобная неустойчивость — общая черта описания множества природных процессов — от астрофизики до явлений общественной жизни. **Долговременные предсказания на основе современных тенденций могут не иметь ничего общего с реальностью из-за первоначально очень малых (обычно теряющихся в флуктуациях и измерительных погрешностях), но экспоненциально растущих отклонений от установленных ныне тенденций.**

больших отклонениях от действительной оси y . Напомним, что истинная волновая функция задачи ψ представляет собой аналитическую функцию координаты x , которая не имеет особенностей на действительной оси, но может иметь на ней несколько (n) нулей.

Вычислим теперь интеграл от логарифмической производной ψ по контуру \mathcal{L} , примыкающему к действительной оси и охватывающему точки поворота так, что квазиклассическое приближение применимо на всем контуре. При этом над областью классического движения на действительной оси x функция $e^{i \int p dx / \hbar}$ экспоненциально велика по сравнению с $e^{-i \int p dx / \hbar}$, и асимптотика волновой функции имеет вид $(1/\sqrt{p})e^{i \int p dx / \hbar}$. Под областью классического движения на действительной оси x соотношение между экспонентами меняется, и асимптотика волновой функции имеет вид $(1/\sqrt{p})e^{-i \int p dx / \hbar}$. Переход от одной асимптотики к другой происходит на дугах, огибающих точки поворота. Величина рассматриваемого интеграла определяется только через вычеты подынтегральной логарифмической производной, которые отвечают нулям волновой функции

$$\oint_{\mathcal{L}} [\psi'(x)/\psi(x)] dx = 2\pi i n.$$

Подставив сюда квазиклассическую волновую функцию в виде $e^{i\alpha}/\sqrt{p}$, найдем

$$I_1 - I_2 = 2\pi i n, \quad \text{где } I_1 = \oint_{\mathcal{L}} i\alpha' dx, \quad I_2 = \frac{1}{2} \oint_{\mathcal{L}} [p'(x)/p(x)] dx.$$

Преобразуем теперь контур, оставаясь в области применимости квазиклассического приближения, так, что его большую часть составят два отрезка, почти совпадающие с действительной осью (сверху и снизу от нее), а концы имеют вид окружностей с центрами в точках поворота и с вырезанной упомянутыми отрезками небольшими дугами. Устремим затем наши отрезки к действительной оси. На верхнем берегу области классического движения, в соответствии со сказанным выше $\alpha' = p(x)/\hbar$. На нижнем берегу меняется и знак величины α' и направление обхода, т. е. вклады обоих берегов в ответ складываются. При этом интеграл I_1 можно распространить на весь отрезок между точками поворота, поскольку вблизи этих точек подынтегральное выражение мало, т. е. $I_1 = \int_a^b [ip(x)/\hbar] dx$. Здесь контурность интеграла отвечает уже классическому движению в обе стороны (по всему периоду классического движения — от a до b и от b до a).

Для вычисления интеграла I_2 заметим, что вдали от точек поворота его вклад мал в силу условия применимости квазиклассического приближения ($|\hbar S_1'| \ll |S_0'|$). Таким образом, остаются только вклады разрезанных окружностей, причем ширина разреза в нашем пределе стремится к нулю. В окрестности точки поворота выражение для $p(x)$ (5.17) можно записать в виде разложения $p = R_i \sqrt{x - x_i}$, и $p'/p = 1/[2(x - x_i)]$, где $x_i = a, b$. Вводя на каждой окружности полярные координаты $x = \rho e^{i\phi} + x_i$, мы найдем, что интеграл по окружности составляет $(1/2) \int_C [p'(x)/p(x)] dx = (1/4)i \int d\phi = i\pi/2$. Вклад другой окружности имеет ту же величину. В итоге $I_2 = \pi i$, и мы получаем **условие квантования Бора-Зоммерфельда**

в виде

$$\alpha \hbar \equiv \oint_a^b p(x) dx \equiv \oint_a^b \sqrt{2m(E - U(x))} dx = 2\pi \hbar (n + 1/2), \quad (5.22)$$

где контурный интеграл отвечает интегрированию по всей классически достижимой области по обоим направлениям движения (по полному периоду классического движения), причем смене направления движения по x отвечает смена знака импульса (другое значение корня).

Полученный ответ означает, что в классически допустимой области укладывается n полувольт (как в прямоугольной яме). Вклад $1/2$ возник из-за отличия «гладкой» ямы от прямоугольной.

• **Нормировка и т. п.** Чтобы нормировать волновую функцию, надо вычислить интеграл от квадрата ее модуля. При этом достаточно учесть только вклад классически доступной области (вне этой области волновая функция быстро убывает):

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^a |\psi(x)|^2 dx = \frac{A^2}{2} \oint \frac{dx}{k(x)} \sin^2 \left(\int_0^x k(x') dx' \right) \\ &= \frac{A^2 \hbar}{4} \oint \frac{dx \left[1 - \cos \left(2 \int_0^a k(x') dx' \right) \right]}{\sqrt{2m(E - U(x))}} \approx \frac{A^2 \hbar}{4} \cdot \oint \frac{dx}{p(x)}. \end{aligned}$$

(В последнем переходе мы учли, что аргумент косинуса не мал, поэтому сам косинус быстро осциллирует, и его среднее значение близко к нулю).

В знаменателе последнего интеграла стоит импульс частицы $p(x) = mv(x)$, где $v(x)$ — классическая скорость частицы. Поэтому интеграл равен периоду классического движения частицы (от 0 до a и от a до 0) $T_{\text{кл}}$, деленному на m . В итоге

$$A = \sqrt{\frac{4m}{\hbar T_{\text{кл}}}} \equiv \sqrt{\frac{2m\omega_{\text{кл}}}{\pi \hbar}} \quad \left(\omega_{\text{кл}} = \frac{2\pi}{T_{\text{кл}}} \right). \quad (5.23)$$

• **Производная по энергии.** В дальнейшем мы неоднократно будем использовать выражение для малого изменения величины α (5.22) при небольшом изменении входящей в это выражение энергии E . Для этого мы вычислим производную

$$\frac{d\alpha}{dE} = \frac{1}{\hbar} \oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = \frac{1}{\hbar} \oint \frac{m}{p} dx = \frac{T_{\text{кл}}}{\hbar}. \quad (5.24)$$

Отсюда, в частности, получается, что разность энергий соседних уровней ΔE_n , которая согласно (5.22) отвечает приращению величины α на 2π , получается из уравнения $2\pi = (d\alpha/dE)\Delta E_n$. Мы получаем в итоге простое соотношение (которое лежало в основе ранней — непоследовательной — версии квантовой механики):

$$\Delta E_n \equiv E_{n+1} - E_n = \frac{2\pi \hbar}{T_{\text{кл}}} = \hbar \omega_{\text{кл}}.$$

■ При обсуждении многих задач используют понятие **фазового пространства** — пространства, координатами которого являются компоненты всех координат и

всех импульсов частиц системы. В частности, для системы из N частиц в трехмерном пространстве фазовое пространство $6N$ -мерно, для одной частицы на прямой — двумерно. Классическое движение частицы описывается кривой в фазовом пространстве. Квазиклассическое состояние можно описывать некоторым распределением плотности в фазовом пространстве.

Для полученных решений *фазовая площадь* $\oint p dx$ растет линейно с ростом номера состояния n , так что в фазовом пространстве на каждое состояние приходится площадь $2\pi\hbar$, а число возможных состояний в ячейке $\Delta x \Delta p$ есть

$$\Delta n = \Delta x \Delta p / (2\pi\hbar). \quad (5.25)$$

(Разумеется, это верно только для достаточно больших n , для основного и первых возбужденных состояний квазиклассическое приближение часто неприменимо.)

5.3.3. Условия сшивки

Неравенство (5.21б) носит *локальный характер*, оно может выполняться не при всех x , и положение областей, где оно справедливо, зависят от энергии. По соглашению, квазиклассическим случаем называют такой случай, когда на большей части прямой x квазиклассическое приближение применимо, а для описания остающихся *небольших* областей используются какие-нибудь другие методы. В частности, квазиклассическое приближение неприменимо вблизи точек поворота (при $U(x) \approx E$), поскольку здесь $d\lambda/dx \rightarrow \infty$.

Напомним, что волновая функция аналитична во всей комплексной x -плоскости, за исключением может быть точек особенности потенциала и бесконечности. Квазиклассические решения уравнения Шредингера представляют собой асимптотики истинной волновой функции при большом значении величины $|\int k(x) dx|$.

Особенности типа точки ветвления в точке поворота, которые имеет **приближенное уравнение** (5.18в) и получающиеся асимптотические решения, отвечают не существованию исходного уравнения Шредингера, а используемому приближению. Поэтому единая асимптотика истинного решения может по-разному выглядеть в разных областях в окрестности точки поворота (пример — для функции $f = ae^{\lambda x} + be^{-\lambda x}$ асимптотики при $x \rightarrow \infty$ и $x \rightarrow -\infty$ несколько не похожи друг на друга). Правила сшивки и устанавливают соотношение между формами единой асимптотики с разных сторон от этой точки.

Чтобы получить эти правила, решения (5.20) достаточно дополнить решением уравнения Шредингера в окрестности точки поворота $x = a$, полученным вне рамок квазиклассического приближения. Здесь можно записать разложение

$$U(x) = E + F \cdot (x - a), \quad (5.26)$$

где F — некоторый коэффициент (сила). Гладкость потенциала обычно обеспечивает справедливость этого приближения и на краю квазиклассической области так, что точное решение уравнения с потенциалом (5.26) при асимптотически больших отклонениях от точки поворота описывается еще и квазиклассическим приближением.

Естественный способ анализа состоит в изучении изменения асимптотики волновой функции при переходе из одной квазиклассической области в другую при движении точки x в комплексной плоскости этой переменной в обход точки поворота на таком расстоянии, что условие применимости квазиклассического приближения выполняется на всем этом пути (метод комплексной плоскости, разд. 5.3.4). С другой стороны, уравнение Шредингера для потенциала (5.26) сводится к *уравнению Эйри*, чьи решения — функции Эйри — выражаются через функции Бесселя порядка $1/3$. Эти функции хорошо исследованы, результаты этого исследования и дают правила сшивки (получаемые обычно с помощью только что сформулированного метода комплексной плоскости). Наконец, можно строить решение и в импульсном представлении, где уравнение Шредингера с потенциалом (5.26) принимает вид $p^2\psi(p)/2m + iF\hbar d\psi(p)/dp = 0$, его решение есть $\psi(p) = A \cdot \exp(ip^3/6\hbar Fm)$. Переход к координатному представлению опять сводится к методу комплексной плоскости. Здесь мы приведем только результат — правила сшивки для перехода из расположенной справа классически недостижимой области в расположенную слева область классического движения:

$$\begin{aligned} \frac{A}{2\sqrt{\varkappa}} \exp\left(-\int_a^x \varkappa dx\right) &\leftrightarrow \frac{A}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_x^a k dx + \pi/4\right), \\ \frac{B}{\sqrt{\varkappa}} \exp\left(\int_a^x \varkappa dx\right) &\leftarrow \frac{B}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_x^a k dx + \pi/4\right). \end{aligned} \quad (5.27)$$

Нетрудно проверить, что вронскианы выписанного решения с обеих сторон от точки поворота совпадают.

Оба этих правила срабатывают при переходе из классически достижимой в классически недостижимую область. Если по каким-то причинам волновая функция убывает при $x \rightarrow \infty$ (например, этого требует граничное условие (2.18) — условие нормируемости волновой функции), то растущей экспоненты нет, и реализуется именно первое правило (5.27). Если же такого условия строгого убывания нет, растущая асимптотика доминирует, а в ее «тени» может «спрятаться» падающая асимптотика с любым коэффициентом, и второе правило не дает определенного предсказания.

Действительная ситуация более благоприятна. На одной из асимптотик, например, $x \rightarrow -\infty$ асимптотика волновой функции точно известна, она или убывает (2.18), или обращается в уходящую или приходящую плоскую волну (2.24). Будем говорить для определенности о первом случае. При увеличении x мы приходим к первой точке поворота. Здесь первое правило (5.27) дает волновую функцию в классически достижимой области. При подходе ко второй точке поворота эта функция приобретает вид суперпозиции решений вида $\sin \alpha$ и ортогонального ему $\cos \alpha$ (где $\alpha = \int_x^b k(x) dx + \pi/4$). Вклад, пропорциональный $\sin \alpha$, продолжается за точку поворота в падающее с ростом x решение по первому правилу (5.27). Вклад, пропорциональный $\cos \alpha$, продолжается за точку поворота в растущее с ростом x решение по второму правилу (5.27). На первый взгляд, коэффициент при растущей экспоненте получен правильно, но вот за коэффициент при падающей экспоненте ругаться нельзя. В действительности, коль скоро мы правильно нашли коэффициент

при растущей экспоненте, коэффициент при падающей экспоненте жестко фиксируется требованием сохранения вронскиана для пары независимых ортогональных друг другу решений линейного дифференциального уравнения второго порядка. Поэтому теперь оба вклада можно довести до следующей точки поворота и т. д. до выхода в область $x \rightarrow -\infty$, где решение фиксируется с помощью одного из граничных условий (2.18) или (2.24).

Если в небольшой окрестности точки поворота, потенциал меняется очень быстро, а вне этой окрестности потенциал — достаточно гладкая функция, то физическую реальность лучше описывает приближение прямоугольного скачка потенциала, для которого условия сшивки имеют вид (2.15), (2.16), стр. 45.

Если классически достижимая область ограничена бесконечно высокой стенкой при $x = a$ (это имеет место при описании радиального движения в трехмерном случае, когда $a = 0$), то при $\psi(x = a) = 0$, а квазиклассическое приближение справедливо вплоть до стенки, т. е. $\psi(x < a) = 0$, и

$$\psi(x > a) = \frac{C}{\sqrt{k}} \sin \left(\int_a^x p dx \right). \quad (5.28)$$

5.3.4. Метод комплексной плоскости для получения правил сшивки

Рассмотрим волновые функции **в плоскости комплексной переменной x** .

◆ **Игрушечный пример.** Рассмотрим уравнение $\omega(x)'' - g^2 \omega(x) = 0$ при $g > 0$ и его решение $\omega = a e^{gx} + b e^{-gx}$. В правой полуплоскости при $Re(x) \gg 1$ асимптотика этого решения имеет вид $\omega \approx a e^{gx}$, в левой полуплоскости при $-Re(x) \gg 1$ асимптотика этого решения имеет совершенно другой вид $\omega \approx b e^{-gx}$. Находясь в правой полуплоскости, нельзя угадать, как выглядит решение в левой полуплоскости, и наоборот. Только на **линии Стокса** $Re x = 0$ растущая и падающая экспоненты сравниваются друг с другом. Именно здесь работают оба асимптотических слагаемых, а при переходе через эти линии (за пределами узких секторов) вид асимптотики меняется скачком, хотя на самом деле мы имеем дело с единой функцией, которая просто по-разному выглядит в разных областях.

◆ Ниже мы будем различать решения уравнения Шредингера — аналитические функции координаты в рассматриваемой области и их квазиклассические асимптотики (5.20), для которых точки поворота — точки ветвления. Во всей области комплексной переменной x , удовлетворяющей условиям квазиклассичности решение можно записать в виде суперпозиции асимптотик (5.20), но коэффициенты этой суперпозиции могут быть неодинаковыми в разных частях этой области.

Запишем вблизи точки поворота $x = a$ приближение $U(x) = E + F(x - a)$ (5.26). Это приближение не меняет свойств аналитичности потенциала, а стало быть и решений уравнения. Обозначая $z = (4mF/3\hbar^2)^{1/3}(a - x)$, мы преобразуем уравнение Шредингера к виду $d^2\psi/dz^2 + (3z/2)\psi = 0$. Выбирая в (5.20) $x_0 = a$, получаем выражения для квазиклассических асимптотик в виде

$$\psi_{\pm k} = z^{-1/4} \exp(\pm iz^{3/2}). \quad (5.29)$$

(При $z \rightarrow -z$ асимптотики $\psi_{\pm k}$ превращаются в $e^{-i\pi/4}\psi_{\pm k}$.)

Рассмотрим решения уравнения Шредингера в комплексной плоскости переменной z . При $z = 0$ наши асимптотики (не точные решения уравнения Шредингера!) имеют корневую точку ветвления. Поэтому в описании появляется *разрез*, выходящий из точки $z = 0$. Направим его для определенности в сторону другой точки поворота, в нашем случае – в положительном направлении оси z .

Мы изучим поведение решений в разрезанной комплексной плоскости переменной z при таких значениях $|z|$, что здесь справедливо и приближение линейности потенциала (5.26) и квазиклассическое приближение. Обозначим $z = \rho e^{i\phi}$, где угол $\phi \in [0, 2\pi)$ отсчитывается от положительного направления z против часовой стрелки. При этом базисные асимптотики (5.29) имеют вид

$$\psi_{\pm k} = e^{-i\phi/4} \rho^{-1/4} \exp(\pm i\rho^{3/2} e^{3i\phi/2}). \quad (5.30)$$

В частности, на верхнем берегу разреза $z \rightarrow \rho$, а на нижнем берегу $z \rightarrow \rho e^{2i\pi}$, и для решений на этих берегах мы имеем (смысл значков "в" и "н" очевиден)

$$\psi_{\pm k}^{\text{в}} = \rho^{-1/4} e^{\pm i\rho^{3/2}}, \quad \psi_{\pm k}^{\text{н}} = e^{-i\pi/2} \rho^{-1/4} e^{\mp i\rho^{3/2}}. \quad (5.31)$$

- Асимптотика решения, удовлетворяющего этим граничным условиям, имеет вид

$$\psi = C_+ \psi_{+k} + C_- \psi_{-k}. \quad (5.32)$$

При этом коэффициенты C_{\pm} могут различаться в разных областях z -плоскости.

◇ Но что означает сумма (5.32)? Здесь полезно повторить другими словами сказанное на стр. 93. На прямых $\text{Im } z^{3/2} = 0$ оба слагаемых суммы имеют одинаковый порядок величины, и мы имеем дело с настоящей суперпозицией. Помимо этих прямых, во всей остальной плоскости $\text{Im } z^{3/2} \neq 0$, при этом одна из функций ψ_{+k} или ψ_{-k} экспоненциально велика, а другая – экспоненциально мала, малый член обычно меньше (степенных) поправок к большому члену, отброшенных при получении асимптотики. Говорить в таком случае о поправке, даваемой этим малым асимптотическим членом, является превышением точности, он «тонет» в тени большого слагаемого. Если мы каким-то образом получили значения волновой функции в этой области, восстановить по ним вклад малого слагаемого невозможно (если только большое слагаемое по каким-то причинам не обращается в нуль тождественно). Тем не менее следить за обоими слагаемыми ψ_{+k} и ψ_{-k} при вычислениях возможно. Действительно, пусть при $\text{Im } z^{3/2} = 0$ мы имеем некоторую волновую функцию ψ_1 с асимптотикой (5.32) с известными коэффициентами C_{\pm} , удовлетворяющую граничным условиям. Помимо этого, можно определить на том же луче $\text{Im } z^{3/2} = 0$ еще и волновую функцию ψ_2 , ортогональную к ψ_1 . Определим теперь Вронскиан $W = \psi_2' \psi_1 - \psi_1' \psi_2$. Асимптотика функции ψ_2 при $\text{Im } z^{3/2} \neq 0$ определяется по поведению в этой области ψ_1 из условия сохранения Вронскиана. Именно такой подход делает осмысленным слежение за обоими независимыми решениями.

■ **Линии Стокса и параметры Стокса.** Особую роль играют линии, на которых действительная часть фазы решений (5.30) обращается в нуль, это лучи $\phi = 0$ (луч 0A), $\phi = 2\pi/3$ (луч 1A) и $\phi = 4\pi/3$ (луч 2A) – см. рис. 5.2. На этих линиях –

сопряженных линиях Стокса — антистоксовых линиях обе асимптотики ψ_{+k} и ψ_{-k} — одного порядка величины¹. На этом рисунке в каждом секторе указана та из функций $\psi_{\pm k}$, которая не убывает.

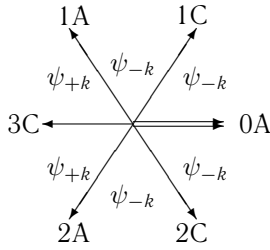


Рис. 5.2.

ψ_{+k} или ψ_{-k} либо возрастает, либо убывает, при переходе через сопряженную линию Стокса эти роли меняются.

На линиях Стокса возрастающая асимптотика ψ_{+k} или ψ_{-k} растет всего быстрее, а другая из этих асимптотик убывает всего быстрее.

Рассмотрим теперь, что происходит с общим решением (5.32) при возрастании ϕ от нуля (луч 0A). При $0 < \phi < 2\pi/3$ (вплоть до луча 1A) функция ψ_{+k} экспоненциально мала, а ψ_{-k} экспоненциально велика. При изменении ϕ отброшенные поправки к ψ_{-k} перестраиваются, и после первой линии Стокса (луч 1C) можно говорить уже, что в рамках нашего приближения коэффициент при падающей асимптотике изменился (пропорционально коэффициенту при растущей асимптотике C_-),

$$C_+ \rightarrow C_+^1 = C_+ + T_1 C_-, \quad C_- \rightarrow C_-^1 = C_- . \quad (5.33a)$$

С этими коэффициентами наше решение вступает в сектор между сопряженными линиями Стокса 1A и 2A. Здесь уже функция ψ_{-k} экспоненциально мала, а ψ_{+k} экспоненциально велика так, что при переходе через линию Стокса 3C

$$C_-^1 \rightarrow C_-^2 = C_-^1 + T_2 C_+^1, \quad C_+^1 \rightarrow C_+^2 = C_+^1 . \quad (5.33б)$$

На сопряженной линии Стокса 2A растущая и падающая экспоненты опять меняются местами, и при переходе через линию Стокса 2C

$$C_+^2 \rightarrow C_+^3 = C_+^2 + T_3 C_-^2, \quad C_-^2 \rightarrow C_-^3 = C_-^2 . \quad (5.33в)$$

Числа T_i называют *параметрами Стокса*.

С коэффициентами C_{\pm}^3 мы подходим к лучу 0A и должны были бы получить исходное выражение (5.32). Однако, мы пришли на нижний берег разреза, где $\psi_{\pm k}^H = -i\psi_{\mp k}^B$ (5.31) (как и ранее, значки n и v указывают на нижний и верхний берега разреза соответственно).

¹Понятия линий Стокса и вводимых ниже параметров Стокса сохраняют смысл и вдали от точек поворота, где разложение (5.26) не работает, лишь бы работало квазиклассическое приближение. Заметим, что некоторые авторы названия «линии Стокса» и «сопряженные линии Стокса» определяют противоположным образом.

Собирая все преобразования (5.33), мы получаем на нижнем берегу разреза

$$\begin{aligned} \psi &= [T_2 C_+ + (1 + T_1 T_2) C_-] \psi_{-k} + \\ &+ [C_+(1 + T_2 T_3) + (T_1 + T_3 + T_1 T_2 T_3) C_-] \psi_{+k}. \end{aligned}$$

Приравнивая это выражение получающемуся из (5.31)

$$\psi = e^{-i\pi/2} [C_+ \psi_{-k} + C_- \psi_{+k}],$$

получаем

$$T_1 = T_2 = T_3 = e^{-i\pi/2} = -i. \quad (5.34)$$

■ **Получение правил сшивки.** Рассмотрим случай, когда решение убывает при $z \rightarrow -\infty$ (в силу требования нормируемости волновой функции), т. е. асимптотика имеет вид $\psi = (-z)^{-1/4} e^{-(-z)^{3/2}}$, где $-z = \rho$. Совершим переход на верхний берег разреза, с линии Стокса ЗС на антистоксову линию 0А (разрез), т. е. сделаем преобразование $-z \rightarrow (-z)e^{-i\pi}$. Вплоть до до антистоксовой линии 1А наша функция была убывающей, на этой линии она стала осциллирующей, а затем превратилось в растущую. После перехода через линию Стокса 1С в соответствии с предыдущим построением к этой возрастающей функции добавилась убывающая функция с коэффициентом T_1 . В итоге на антистоксову линию 0А прибыло решение

$$\begin{aligned} &e^{i\pi/4} \rho^{-1/4} \left(e^{-i\rho^{3/2}} + T_1 e^{i\rho^{3/2}} \right) \equiv \\ &\equiv e^{i\pi/2} \rho^{-1/4} \left(e^{-i(\rho^{3/2} + \pi/4)} - e^{i(\rho^{3/2} + \pi/4)} \right) \equiv \\ &\equiv 2\rho^{-1/4} \sin(\rho^{3/2} + \pi/4) \Rightarrow \frac{2}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_a^x k dx + \pi/4\right). \end{aligned} \quad (5.35)$$

Таким образом мы получили первое правило сшивки (5.27). Второе из этих правил сшивки подобным образом не получается, т. к. под растущей экспонентой может «скрываться» падающая с любым коэффициентом. Здесь удобнее стартовать с волновой функции $\frac{1}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_a^x k dx + \pi/4\right)$, которая ортогональна предыдущей в физически достижимой области, записать ее как сумму экспонент, и для каждой из них повторить изложенную выше процедуру в противоположном направлении. Сохранение вронскиана гарантирует правильность полученного ответа.

5.3.5. Правила квантования Бора–Зоммерфельда. II.

Получим теперь правило квантования Бора–Зоммерфельда (5.22) традиционным методом — с помощью правил сшивки. Для сокращения объема вычислений мы рассмотрим потенциальную яму, изображенную на рис. 5.3.

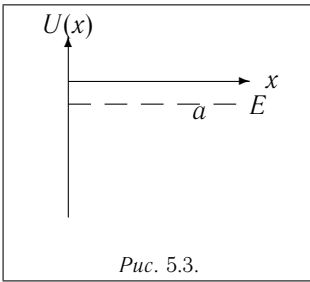


Рис. 5.3.

Здесь область $x < 0$ полностью недоступна (как для радиального движения в центрально-симметричном поле). Будем искать уровни энергии, пользуясь алгоритмом, который подобен используемому при компьютерном моделировании.

Поскольку область $x < 0$ недоступна, то в соответствии с (5.28) внутри ямы $\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_0^x k dx\right)$. Теперь надо пройти точку поворота $x = a$. Чтобы воспользоваться условиями сшивки (5.27), введем

величины $\alpha = \int_0^a k dx + \pi/4$, $\varphi = \int_x^a k dx + \pi/4$ и перепишем волновую функцию внутри ямы в виде

$$\frac{A}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_0^x k dx\right) = \frac{A}{\sqrt{k}} \sin(\alpha - \varphi) = \frac{A}{\sqrt{k}} (\sin \alpha \cos \varphi - \cos \alpha \sin \varphi).$$

Далее, воспользуемся условиями сшивки для каждого из слагаемых и получим волновую функцию в классически недоступной области:

$$\psi = \frac{A}{\sqrt{\varkappa}} \sin \alpha \cdot \exp\left(\int_a^x \varkappa dx\right) - \frac{A}{2\sqrt{\varkappa}} \cos \alpha \cdot \exp\left(-\int_a^x \varkappa dx\right).$$

Волновая функция должна убывать при $x \rightarrow \infty$. Поэтому стационарными являются только такие состояния, для которых коэффициент при растущей экспоненте ($\sin \alpha$) обращается в ноль, т. е. при $\alpha = \pi(n + 1)$. Удваивая обе части равенства, мы приходим слева к интегралу по периоду классического движения — $0 \rightarrow a \rightarrow 0$. В итоге энергия уровня E определяется из условия

$$\oint \sqrt{2m(E - U(x))} dx = 2\pi\hbar(n + 3/4). \quad (5.36)$$

Покажите, что для потенциала, гладкого в обе стороны, условие квантования Бора–Зоммерфельда принимает вид (5.22). (Различие между 1/2 и 3/4 в правилах (5.22) и (5.36) улавливается точностью приближения даже при умеренно больших n .)

В соответствии с критерием (5.21а), условия квантования дают хорошее описание решений только при больших n .

5.3.6. Прохождение сквозь барьер

Если энергия частицы меньше максимальной потенциальной энергии (рис. 5.4), то в классическом механике области с разных сторон барьера не сообщаются друг с другом. В квантовом случае волновая функция, заданная, например, слева от барьера, не исчезает и справа от него, имеет место (*подбарьерное прохождение — туннелирование*), подобно тому, что обсуждалось в связи с (2.27).

В условиях применимости квазиклассического приближения задача о прохождении сквозь потенциальный барьер (о туннелировании) решается по стандартному рецепту с двукратным использованием правил шивки (5.27). Вероятность туннелирования определяется величиной коэффициента прохождения (*туннелирования*)¹

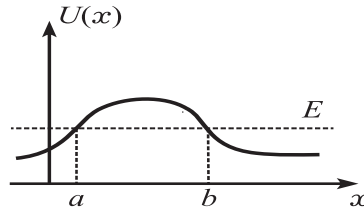


Рис. 5.4. Прохождение через барьер

$$D = \exp \left[-2 \int_a^b \kappa(x) dx \right] \quad (a \text{ и } b \text{ — точки поворота}). \quad (5.37)$$

При $D \ll 1$ направо от барьера уходит волна очень малой амплитуды, и отражение асимптотически мало

$$\psi_{\text{II}} = \frac{C}{\sqrt{k}} e^{i \int_b^x k(x) dx + \pi/4} = \frac{C}{\sqrt{k}} \left(\cos \left(\int_b^x k(x) dx + \pi/4 \right) + i \sin \left(\int_b^x k(x) dx + \pi/4 \right) \right).$$

Прямое использование правил шивки (5.27) дает под барьером суперпозицию падающей и растущей экспонент

$$\psi_{\text{II}} = \frac{C}{\sqrt{\kappa}} \left(e^{\int_a^b \kappa(x) dx} + \frac{i}{2} e^{-\int_a^b \kappa(x) dx} \right) = \frac{C}{\sqrt{\kappa}} \left(\frac{1}{\sqrt{D}} e^{-\int_a^x \kappa(x) dx} + \frac{i}{2} \sqrt{D} e^{\int_a^x \kappa(x) dx} \right).$$

Дальнейшее использование этих правил дает слева от барьера

$$\psi_{\text{I}} = \frac{2C}{\sqrt{D} k} \left(\sin \alpha + \frac{iD}{4} \cos \alpha \right), \quad \alpha = \int_x^a k(x) dx + \frac{\pi}{4}. \quad (5.38)$$

Учет второго слагаемого является здесь превышением точности (коэффициент при нем является экспоненциально малым).

Таким образом, амплитуда прошедшей волны в \sqrt{D} раз меньше амплитуды падающей волны (коэффициент туннелирования D). В этом приближении в падающей и отраженной волнах потоки вероятности равны друг другу, а в прошедшей — в D раз меньше (коэффициент отражения равен 1, коэффициент прохождения равен D), закон сохранения вероятности выполняется с точностью до малой величины D . Чтобы сделать эти выводы явными обычно нормируют первое слагаемое на равный единице поток в падающей волне, выбирая $C = \sqrt{D}$.

Поправки порядка D , содержащиеся в (5.38) находятся за пределами точности приближения. Они отвечают поправкам на конечную глубину проникновения в электродинамике. Учет этих поправок формально восстанавливает закон сохранения вероятности.

Обратите внимание что сдвиг фаз между отраженной и падающей волнами составляет π — в точности как при отражении от проводника в электродинамике.

¹Напомним: для прямоугольного барьера коэффициент прохождения описывается похожим соотношением (2.27) $D \approx e^{-2\kappa(b-a)}$.

5.3.7. Время жизни квазистационарного состояния

Рассмотрим частицу в поле рис. 5.5. Если бы потенциал после максимума не убывал с ростом x , частица имела бы вполне определенные стационарные состояния с энергиями E_n . В классическом случае состояние с энергией E_n отвечает незатухающим колебаниям между точками 0 и a . Существование падающей ветви потенциала позволяет частице проникать сквозь барьер (туннелирование) и уходить к $x \rightarrow \infty$, состояние становится нестационарным. Квазиклассический подход позволяет описать эту нестационарность при условии, что коэффициент туннелирования достаточно мал. Ниже мы используем основные определения, введенные в разд. 2.4.5.

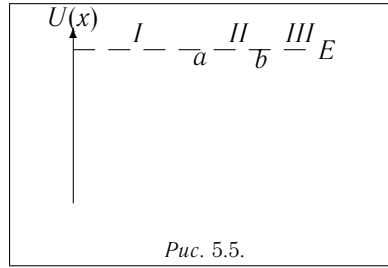


Рис. 5.5.

Условие невозрастания вероятности со временем в нашей задаче выглядит как требование, чтобы на больших расстояниях оставалась только уходящая из центра волна (при этом вероятность убывает со временем). Из этого условия и получаются ниже комплексные значения энергии квазиуровня.

Последовательное применение условий сшивки (5.27) (как при квантовании) дает с использованием обозначений (5.37) и $\alpha = \int_0^a k dx + \pi/4$, $z_1 = \int_a^x \kappa dx$, $z_2 = \int_x^b \kappa dx$,

$$\beta = \int_b^x k dx + \pi/4$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_0^x k dx\right), & (I) \\ \frac{A}{\sqrt{\kappa}} \left[\sin \alpha \cdot e^{z_1} - \frac{\cos \alpha}{2} \cdot e^{-z_1} \right] = & (II) \\ = \frac{A}{\sqrt{\kappa D}} \left[\sin \alpha \cdot e^{-z_2} - D \frac{\cos \alpha}{2} e^{z_2} \right], & \\ \frac{A}{\sqrt{k D}} \left[2 \sin \alpha \cdot \sin \beta - D \frac{\cos \alpha}{2} \cdot \cos \beta \right]. & (III) \end{cases} \quad (5.39)$$

Условие, чтобы в области III была только уходящая волна $e^{i\beta}$, дает уравнение:

$$\frac{2 \sin \alpha}{\left(-\frac{D \cos \alpha}{2}\right)} = i \Rightarrow \operatorname{tg} \alpha = -iD/4. \quad (5.40)$$

(Подобный ответ для системы прямоугольных барьеров и ям получается с помощью условий сшивки (2.16).)

Далее мы считаем туннелирование слабым, т. е. $D \ll 1$.

При $b \rightarrow \infty$ было бы $D = 0$, и в системе нашлись бы стационарные состояния с энергиями $E = E_n$, которые изучались в разд. 5.3.5. При $D \neq 0$ движение инфинитно, т. е. стационарных состояний нет. Однако физическая ситуация при $D \ll 1$ не может

сильно измениться по сравнению со случаем $D = 0$, и решения уравнения (5.40) должны лишь ненамного отличаться от решений условий квантования $\alpha = \pi(n + 1)$ (5.36). Поэтому запишем $\alpha = \pi(n + 1) + \delta_n$, где $|\delta_n| \ll 1$. Тогда уравнение (5.40) преобразуется к виду

$$-iD/4 = tg\delta_n \approx \delta_n \Rightarrow \alpha = \pi(n + 1) - iD/4.$$

Окончательно, выражая величины α и k (5.20) через комплексную энергию состояния $\bar{E}_n = E_n - i\Gamma_n/2$, получаем

$$\int_0^a \sqrt{2m(E_n - i\Gamma_n/2 - U(x))} dx = \pi\hbar(n + 3/4) - i\hbar D_n/4.$$

Вычитая это выражение из (5.36), получим с учетом (5.24) и малости Γ_n

$$\begin{aligned} i\hbar D_n/4 &= \int_0^a \sqrt{2m(E_n - U(x))} dx - \int_0^a \sqrt{2m(E_n - i\Gamma_n/2 - U(x))} dx = \\ &= \frac{1}{4} \hbar \frac{d\alpha}{dE} i\Gamma_n = \frac{i\Gamma_n}{4} \cdot T_{\text{кл}}, \end{aligned}$$

т. е. время жизни τ оказалось равным классическому периоду $T_{\text{кл}}$, деленному на вероятность D_n ухода через барьер при однократном подходе к барьеру:

$$\Gamma_n = \hbar D_n/T_{\text{кл}} \Rightarrow \tau = T_{\text{кл}}/D_n. \quad (5.41)$$

Для атомной или молекулярной системы характерный период $T_{\text{кл}}$ определяется отношением атомного размера $\gtrsim 10^{-8}$ см к атомной скорости электрона $\lesssim \alpha c \sim 10^8$ см/с, т. е. $T_{\text{кл}} \gtrsim 10^{-16}$ с. Учет коэффициента туннелирования обычно значительно увеличивает это время. Эта численная оценка показывает также, что квазиклассический подход несомненно не работает для атомных или твердотельных систем при частотах выше 10^{15} Гц.

◆ Формула (5.41) дает ставшее ныне классическим решение **задачи об α -распаде атомного ядра** с первоначальным зарядом Ze (теория *Мандельштама–Гамова*). В этой теории предполагается, что в ядре можно выделить α -частицу (ядро атома гелия ${}^4\text{He}$), которая движется в поле, создаваемом остальными нуклонами (нейтронами и протонами) ядра, сначала внутри ядра — потенциальной ямы радиуса $a \sim 1$ фм, а затем вне его. В отсутствие туннелирования энергия α -частицы в яме составила бы $E > 0$. Вне ядра α -частица движется в кулоновском поле ядерного остатка, это взаимодействие описывается потенциалом $U(r) = \beta/r$, где $\beta = 2(Z - 2)e^2$.

Коэффициент туннелирования сильно зависит от энергии, при $E \ll \beta/a$ это $D = \exp(-4/3) \sqrt{2m\beta^2/(\hbar^2 E)}$. Множитель $T_{\text{кл}}$ зависит от энергии значительно слабее, для его грубой оценки можно аппроксимировать поле ядра моделью прямоугольной (радиальной) ямы с радиусом $a \sim 1$ фм и глубиной несколько МэВ. В итоге связь между временем жизни ядра и энергией α -частицы (5.41) записывается в виде **закона Гейгера-Нетолла**

$$\log_{10}(\tau/1\text{sec}) = A + B/\sqrt{E}. \quad (5.42)$$

Типично для тяжелых ядер $B \approx 130 \div 150 \text{ МэВ}^{1/2}$, $A \approx -50$ (эти числа немного различаются для разных ядер. Это — очень сильная зависимость от энергии уровня E (хорошо измеряемой величины). Согласно (5.42) при увеличении E от 4 до 9 МэВ время жизни падает на 20 порядков, с 10^8 лет до 10^{-5} с. Такая сильная зависимость подтверждена опытом (для таких различий отклонения даже в десятки раз не очень существенны).

5.3.8. Двойная яма

Важный и поучительный пример доставляет исследование двойной почти симметричной ямы.

Пусть поле $U(x)$ представляет собой две очень немного различающиеся потенциальные ямы, разделенные не очень высоким барьером рис. 5.6. Если бы барьер был непроницаем (бесконечно высок), то существовали бы состояния $\psi_{0л}(x)$ и $\psi_{0п}(x)$ с энергиями $E_{0л} \approx E_{0п}$, отвечающие движению частицы в одной из ям.

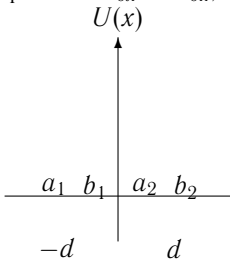


Рис. 5.6.

Если бы ямы были одинаковыми, то было бы $E_{0л} = E_{0п} \equiv E_0$, $\psi_{0п}(x) = \psi_{0л}(x + 2d)$. В последнем случае существование переходов через барьер приводит к расщеплению каждого из этих состояний на два (аналог — биения в системе двух связанных одинаковых маятников). В этих состояниях частица живет одинаково долго в каждой из ям.

Что же происходит, когда ямы немного различаются?

Рассмотрим эту задачу в полной аналогии с предыдущими, используя правила сшивки (5.27). Естественные обозначения: слева от точки поворота a_1 расположена область I, между точками поворота a_1 и b_1 — область II, между точками поворота b_1 и a_2 — область III, между точками поворота a_2 и b_2 — область IV, правее точки поворота b_2 — область V. Помимо этого обозначим текущие значения показателей квазиклассических экспонент ϕ_i , t_i и величины, удобные для описания изменения направления отсчета в каждой из областей с левого края на правый:

$$\begin{aligned} \phi_{1\ell} &= \int_{a_1}^x k(x)dx + \frac{\pi}{4}, & \phi_{1r} &= \int_x^{b_1} k(x)dx + \frac{\pi}{4}, & \alpha_1 &= \int_{a_1}^{b_1} k(x)dx + \frac{\pi}{2}, \\ \phi_{2\ell} &= \int_{a_2}^x k(x)dx + \frac{\pi}{4}, & \phi_{2r} &= \int_x^{b_2} k(x)dx + \frac{\pi}{4}, & \alpha_2 &= \int_{a_2}^{b_2} k(x)dx + \frac{\pi}{2}; \\ t_\ell &= \int_{b_1}^x \varkappa(x)dx, & t_r &= \int_x^{a_2} \varkappa(x)dx, & D &= e^{-2 \int_{b_1}^{a_2} \varkappa(x)dx}. \end{aligned}$$

Построим теперь выражения для волновых функций в каждой из областей, стар-
туя с области I, где — в силу требования нормируемости — волновая функция ис-

чезает при $x \rightarrow -\infty$.

$$(I) : \psi = \frac{A}{2\sqrt{\varkappa}} e^{-\int_x^{a_1} \varkappa(x) dx} \Rightarrow$$

$$(II) : \Rightarrow \frac{A}{\sqrt{k}} \sin \phi_{1\ell} = \frac{A}{\sqrt{k}} \sin(\alpha_1 - \phi_{1r}) = \frac{A}{\sqrt{k}} (\sin \alpha_1 \cos \phi_{1r} - \cos \alpha_1 \sin \phi_{1r}) \Rightarrow$$

$$(III) : \Rightarrow \frac{A}{\sqrt{\varkappa}} \left(\sin \alpha_1 e^{t_1} - \frac{1}{2} \cos \alpha_1 e^{-t_1} \right) = \frac{A}{\sqrt{\varkappa}} \left(\frac{1}{\sqrt{D}} \sin \alpha_1 e^{-t_2} - \frac{\sqrt{D}}{2} \cos \alpha_1 e^{t_2} \right) \Rightarrow$$

$$(IV) : \Rightarrow \frac{A}{\sqrt{k}} \left[2 \frac{\sin \alpha_1}{\sqrt{D}} \sin \phi_{2\ell} - \frac{\sqrt{D}}{2} \cos \alpha_1 \cos \phi_{2r} \right] =$$

$$\frac{A}{\sqrt{k}} \left[2 \frac{\sin \alpha_1}{\sqrt{D}} \sin(\alpha_2 - \phi_{2r}) - \frac{\sqrt{D}}{2} \cos \alpha_1 \cos(\alpha_2 - \phi_{2r}) \right] =$$

$$\frac{A}{\sqrt{2kD}} [(4 \sin \alpha_1 \sin \alpha_2 - D \cos \alpha_1 \cos \alpha_2) \cos \phi_2 - (4 \sin \alpha_1 \cos \alpha_2 + D \cos \alpha_1 \sin \alpha_2) \sin \phi_2] \Rightarrow$$

$$(V) : \Rightarrow \frac{A}{\sqrt{\varkappa}} \left[(4 \sin \alpha_1 \sin \alpha_2 - D \cos \alpha_1 \cos \alpha_2) e^{\int_x^{a_2} \varkappa dx} - (4 \sin \alpha_1 \cos \alpha_2 + D \cos \alpha_1 \sin \alpha_2) e^{\int_x^{a_2} \varkappa dx} / 2 \right].$$

Значение энергии состояния определяется из требования обращения в нуль коэффициента при растущей вправо экспоненте

$$4 \sin \alpha_1 \sin \alpha_2 - D \cos \alpha_1 \cos \alpha_2 = 0. \quad (5.43)$$

Мы ищем значения энергии собственных состояний двойной ямы E , близкие к энергии состояния в уединенной яме E_0 .

• Рассмотрим сначала случай **симметричной ямы** $E_{0л} = E_{0п} \equiv E_0$. В этом случае $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$ и $E = E_0 + \Delta$, где Δ – малая добавка. Разлагая подынтегральное выражение в величине α по малой добавке Δ с помощью (5.24), имеем

$$\alpha = \alpha_0 + \frac{T\Delta}{2\hbar}.$$

Здесь α_0 – значение величины α при $E = E_0$, а T – период колебаний частицы в уединенной яме, например, левой. При этом согласно правилу квантования (5.22) $\sin \alpha_0 = 0$, $\cos \alpha \approx \cos \alpha_0 \approx \pm 1$. Таким образом, мы получаем уравнение

$$\left(\frac{T\Delta}{2\hbar} \right)^2 = \frac{D}{4} \Rightarrow \Delta = \pm \Delta_s, \quad \text{где } \Delta_s = \sqrt{D} \frac{\hbar}{T}. \quad (5.44)$$

Таким образом, уровень расщепился на два, и расщепление энергий Δ_s в \sqrt{D} раз меньше расстояния между уровнями уединенной ямы.

Подстановка полученных решений в выписанные выше волновые функции, показывает, что для энергии $E = E_0 - \Delta_s$ волновая функция в правой яме такова же, как

и в левой, $\psi_{0л}(x) = \psi_{0л}(x + 2d)$ (в целом симметричная функция), а для другого значения энергии $E = E_0 + \Delta_S$ волновая функция в правой яме имеет противоположный знак, $\psi_{0п}(x) = -\psi_{0п}(x + 2d)$ (в целом антисимметричная функция).

Нетрудно увидеть теперь, что если частица в начальный момент находится в правой яме ($\psi(x, t = 0) = \psi_{0п}(x)$), то через время $\pi\tau/2$ она окажется в левой яме, т. е.

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

где частота биений $\tau = 2\hbar/\Delta_S = 2T/\sqrt{D}$.

• **Небольшое отклонение от симметрии.** Рассмотрим теперь случай небольшого отклонения от симметрии, когда уединенные ямы близки по форме друг к другу, но их энергии отличаются друг от друга меньше, чем расстояние между уровнями внутри каждой из ям \hbar/T ,

$$E_{0л} = E_0 - \delta, \quad E_{0п} = E_0 + \delta, \quad \delta \ll \hbar/T. \quad (5.45)$$

В последующих вычислениях мы будем считать все, что относится к каждой из ям одинаковым, за исключением малых величин $\sin \alpha_i$. Обозначая, как и прежде, через Δ отклонение истинной энергии от усредненной энергии уединенных ям E_0 , найдем из (5.43) точно так же, как и выше

$$\frac{(\Delta - \delta)T}{2\hbar} \cdot \frac{(\Delta + \delta)T}{2\hbar} = \frac{D}{4} \Rightarrow \Delta = \pm \sqrt{\delta^2 + \Delta_S^2}, \quad (5.46)$$

где мы сохранили введенное выше обозначение Δ_S (5.44).

Отсюда видно, что расщепление термов близко к тому, что было в симметричном случае, если расщепление исходных термов δ меньше того, которое дается туннелированием, $\Delta_S > \delta$. Наоборот, если $\Delta_S < \delta$, туннелирование не меняет уровней.

Прямой сравнение амплитуд выписанной выше волновой функции в областях IV (вторая форма) и II в обоих указанных предельных случаях показывает следующее.

∇ При $\delta \gg \Delta_S$ состояния с высокой точностью остаются локализованными справа или слева, туннелирование почти не меняет состояний, биений не возникает.

Действительно, для решения $\Delta = +\sqrt{\delta^2 + \Delta_S^2}$ амплитуда волновой функции в области IV в δ/Δ_S раз больше амплитуды в области II, система почти полностью реализуется в правой яме. Точно так же, для решения $\Delta = -\sqrt{\delta^2 + \Delta_S^2}$ амплитуда волновой функции в области IV в δ/Δ_S раз меньше амплитуды в области II, система почти полностью реализуется в левой яме.

∇ При $\delta \ll \Delta_S$ расщепление исходных термов δ несущественно по сравнению с эффектом туннелирования, смешивающего состояния.

Действительно, для обоих решений $\Delta = \pm\sqrt{\delta^2 + \Delta_S^2}$ амплитуда волновой функции в области IV — того же порядка величины, что и в области II. Более подробно, для решения с $\Delta = -\sqrt{\delta^2 + \Delta_S^2}$ волновая функция симметрична, а при $\Delta = +\sqrt{\delta^2 + \Delta_S^2}$ волновая функция антисимметрична — как и в случае, когда расщепление исходных термов δ отсутствует.

Иными словами, если имеются две немного различающиеся ямы (в том смысле, как мы говорили только что), то при большом расстоянии между ними — когда коэффициент туннелирования очень мал — возможные состояния локализованы в этих ямах. По мере сближения ям — при увеличении коэффициента туннелирования — происходит обобществление состояний, и при $D > (T\delta/\hbar)^2$ мы приходим к симметричным или антисимметричным состояниям или к биениям между двумя ямами.

Это — вполне естественный результат. С небольшими модификациями он сохраняется и для случая, когда ямы отличаются сильно, но какая-то пара их уровней близка друг к другу (почти вырождена).

5.3.9. Надбарьерное отражение

Если волна с большой энергией (большим волновым числом) проходит над небольшой по величине неоднородностью потенциала, она продолжает двигаться вперед *почти* без искажений, но возникает и отраженная волна небольшой амплитуды. Это явление называют надбарьерным отражением. Разумеется, это явление имеет место для волн любой природы, но мы ограничимся изучением квантовой задачи.

Заранее ясно, что коэффициент надбарьерного отражения — малая величина.

Итак, рассмотрим задачу о распространении волны в случае, когда $E > U(x)$ при всех x . Для решения этой задачи надо вести рассмотрение в плоскости **комплексной переменной** x . Если потенциал $U(x)$ — аналитическая функция x , отличная от константы, то в силу действительности $U(x)$ при действительных x уравнение $E = U(x)$, не имея решений на действительной оси, имеет только пары комплексно сопряженных решений, отвечающих *комплексным точкам поворота* $x_{i\pm}^E = \alpha_i \pm i\beta_i$. Если энергия E очень велика, то уравнение для точки поворота имеет решения только вблизи особенностей потенциала (решений уравнения $V(x) = \infty$) с координатами $x_{i\pm}^V = a_i \pm ib_i$. При очень больших энергиях положения особенностей $x_{i\pm}^V$ и $x_{i\pm}^E$ очень близки друг к другу.

Мы разберем здесь лишь случай умеренно больших энергий, когда расстояние между точками $x_{i\pm}^V$ и $x_{i\pm}^E$ не очень мало.

Рассмотрим для начала случай, когда в верхней полуплоскости есть лишь одна комплексная точка поворота $x_{0+}^E = \alpha_0 + i\beta_0$ (и один в нижней полуплоскости $x_{0-}^E = \alpha_0 - i\beta_0$). В этом случае разрез в комплексной плоскости удобно направить от одной комплексной точки поворота к другой (по вертикали вниз). Структура линий Стокса вблизи каждой из точек поворота сходна с той, что обсуждалась выше, но на больших расстояниях от этих точек эта структура усложняется из-за наличия особенностей $x_{i\pm}^V$. Помимо этого, линии Стокса искривляются так, что линии OA и 3C асимптотически приближаются к действительной оси (сверху для точки поворота x_0 и снизу для точки поворота x_{0-}^E).

Запишем прошедшую волну $\psi_{\text{пр}} = \frac{1}{\sqrt{k}} \exp\left(i \int_{x_1}^x k(x) dx\right)$. Здесь x_1 — некоторая точка на действительной оси. Проследим, как меняется это решение при обходе против часовой стрелки в верхней полуплоскости по контуру C, огибающему сверху точку x_{0+}^E и проходящему ниже точки $x_{i\pm}^V$ так, что на этом контуре погрешность

квазиклассического приближения достаточно мала. Обход точки x_{0+}^E приводит к изменению знака показателя экспоненты ($k \rightarrow ke^{i\pi}$), т. е. дает отраженную волну

$$\psi_{\text{отр}} = \frac{1}{\sqrt{k}} e^{-i \int_{x_1}^x k(x) dx + i \int_c^x k(x) dx}.$$

В итоге коэффициент отражения

$$R = \left| \frac{\psi_{\text{отр}}}{\psi_{\text{пр}}} \right|^2 = e^{-2 \text{Im} \int_c k dx}. \quad (5.47)$$

Теперь следует вычислить контурный интеграл в показателе экспоненты. Продолжим этот контур по действительной оси до точки $x_\ell = \alpha - \varepsilon$, затем направим его вверх, обогнем сверху точку ветвления $x_0 = \alpha + i\beta_0$ по окружности малого радиуса ε , спустимся на действительную ось в точке $x_r = \alpha + \varepsilon$ и продолжим по действительной оси до начала нашей дуги. Получившийся контур не содержит внутри себя особых точек. Поэтому интеграл по всему контуру равен нулю. Далее, на действительной оси $k(x)$ действительна. Поэтому ее вклад в искомую мнимую часть обращается в ноль. В итоге при $\varepsilon \rightarrow 0$ наш интеграл обращается в удвоенный интеграл по пути от $x_1 = \alpha_0$ до $x_0 = \alpha_0 + i\beta_0$,

$$R = e^{-4\sigma}, \quad \sigma = \text{Im} \int_{x_1}^{x_0} k(x) dx. \quad (5.48)$$

◆ Случай большой энергии, когда $x_{i\pm}^V$ и $x_{i\pm}^E$ очень близки друг к другу, требует отдельного рассмотрения. Мне не известно, проводилось ли такое рассмотрение в достаточно общем виде.

§ 5.4. Задачи

- Используя (5.1), показать, что при переходе от потенциала $U(x)$ к потенциалу $U(x) + \Delta U(x)$ с $\Delta U(x) \leq 0$ энергия основного состояния уменьшается.
- Используя пробные функции (пф) трех типов

$$(\alpha) Ce^{-x^2/2a^2}; \quad (\beta) Ce^{-|x|/a}; \quad (\gamma) \begin{cases} 0 & \text{при } |x| > a, \\ 1 - |x|/a & \text{при } |x| < a, \end{cases}$$

с помощью вариационного метода найти энергию и волновую функцию основного состояния для следующих систем:

- гармонический осциллятор, пф α и β ;
 - ангармонический осциллятор $U = m\omega^2 x^2/2 + \epsilon x^4$, пф α ;
 - яма $U = -G\delta(x)$, пф α , β и γ ;
 - поле $U(x) = U_0|x|$, пф β .
- Вычислите в первом исчезающем приближении поправки к уровням под действием возмущения V в следующих полях U :

$$\text{а) } U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}, \quad V = (\alpha) bx^3, (\beta) cx^4, (\gamma) f|x|, (\delta) \lambda x^5 + \beta bx^6;$$

$$\text{б) } U(x, y) = \frac{m\omega^2(x^2 + y^2)}{2}, \quad V = \alpha xy;$$

$$\text{в) } U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } |x| < a, \\ \infty & \text{при } |x| > a, \end{cases} \quad V = (\alpha) G\delta(x), (\beta) C \cos \frac{2\pi x}{a};$$

$$\text{г) } \hat{H}_0 = \frac{\hat{L}_z^2}{2I}; \quad (\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}); \quad V = V_0 \cos(\varphi - \alpha);$$

$$\text{д) } U(\mathbf{r}) = m\omega^2 \mathbf{r}^2/2; \quad V = \gamma x^2 y^2.$$

е) $U(x, y) = m\omega^2[(4 + 4\varepsilon)x^2 + y^2]/2$ ($\varepsilon \ll 1$); $V = \alpha xy^2$. Найти поправки к трем нижним уровням. Особо рассмотреть случай $\varepsilon = 0$ (резонанс Ферми).

4. При $G \gg \delta G$ найти уровни энергии частицы в поле

$$V = -(G + \delta G)\delta(x - a) - (G - \delta G)\delta(x + a).$$

Рассмотреть еще случай $2mGa/\hbar^2 \ll 1$.

5. Как меняется среднее значение координаты $\langle x \rangle$ с ростом энергии уровня для осциллятора $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + m\omega^2 x^2/2$ с возмущением $V = \gamma x^3$? Свяжите ответ с задачей о расширении твердого тела.

6. Изобразите качественно типичную зависимость уровней от параметра ξ при переходе через точку $\tilde{V}_{11} = \tilde{V}_{22}$ для задачи о «пересечении уровней», обсуждавшейся в конце раздела 5.2.4.

В последующих задачах условие квазиклассичности предполагается выполненным, решение предлагается искать в квазиклассическом приближении (кроме задач с дополнительным указанием).

7. Найти уровни энергии и волновые функции:

а) для осциллятора;

б) для частицы в поле тяжести над непроницаемой плитой;

в) для атома водорода.

8. Вычислить коэффициенты A и B в законе Гейгера–Нетолла (5.42) для U^{238} с радиусом ядра 1 fm , $E \approx 2 \text{ МэВ}$, $U_{\text{max}} - E \approx 12 \text{ МэВ}$, расстояние между точками поворота $b - a \approx 3 \cdot 10^{-12} \text{ см}$. Сравнить с известным периодом полураспада урана 4,5 млрд. лет.

9. Найти коэффициент прохождения в поле $U(x) = -m\omega^2 x^2/2$.

10. Оценить число уровней в яме с потенциалом $U(x)$, имеющим вид

$$\text{(а) } -\frac{g^2}{r} e^{-r/a}, \quad \text{(б) } f \cdot (|x| - a)\theta(a - |x|),$$

$$\text{(с) } \frac{k(x^2 - a^2)}{2} \theta(a - |x|), \quad \text{(д) } \left(\frac{\beta}{a} - \frac{\beta}{x} \right) \theta(a - x)\theta(x).$$

11. Найдите положение и ширину квазистационарных уровней в полях $V =$

$$\text{(а) } \begin{cases} -V_1 & \text{при } |x| < a, \\ V_2 & \text{при } a < |x| < a + b, \\ 0 & \text{при } |x| > a + b, \end{cases} \quad \text{(б) } a|x| - bx^2,$$

$$\begin{aligned}
 (c) & \begin{cases} a|x| & \text{при } |x| < l, \\ al + bl^2 - bx^2 & \text{при } |x| > l, \end{cases} & (d) & \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0 \\ G\delta(x-a) & \text{при } x > 0, \end{cases} \\
 (e) & \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0, \\ 0 & \text{при } x < a \text{ и при } x > b+a, \\ V & \text{при } a < x < a+b, \end{cases} & (f) & \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0, \\ 0 & \text{при } 0 < x < a, \\ \beta/x^2 & \text{при } x > a. \end{cases} \\
 (g) & \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0, \\ 0 & \text{при } 0 < x < a; x > b, \\ U_0(1-x/b) & \text{при } b > x > a \end{cases}
 \end{aligned}$$

Для потенциала (a) сравнить с точным решением, вычислить также коэффициент прохождения, считая, что при $b \rightarrow \infty$ появляется уровень энергии $E_n > 0$. При конечном b рассмотреть поведение коэффициента прохождения для небольших $|E - E_n|$. Показать, что этот коэффициент обращается в бесконечность при $E = E_n - i\Gamma_n/2$. Найти Γ_n и сравнить с выражением (5.41). Для потенциала (e) считать $V \gg \hbar^2/(2ma^2)$, так что уровни можно оценивать как в очень глубокой яме. Для потенциала (f) считать b/a большим. Для потенциала (d) обсудить случай малопроницаемого барьера $G \gg \hbar^2/ma$.

Глава 6

МОМЕНТ ИМПУЛЬСА

Мы отмечали уже в § 2.2, что в системах, чьи свойства не меняются при вращениях, сохраняется момент импульса (в англоязычной литературе — angular momentum — угловой импульс). Соответствующий оператор строится в точности по той же схеме, что и оператор импульса в § 1.7 — посредством изучения бесконечно-малых вращений. Совершенно естественно, что возникающий при этом оператор момента импульса частицы задается, как и в классическом случае, соотношением

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \equiv \hbar \cdot \hat{\ell}. \quad (6.1)$$

Здесь определен еще удобный безразмерный оператор $\hat{\ell} \equiv \hat{\mathbf{L}}/\hbar$, его мы тоже называем оператором момента импульса.

Решая задачу 1.20 на стр. 36, мы установили, что имеют место перестановочные соотношения

$$[\hat{\ell}_i, \hat{\ell}_j] = ie_{ijk}\hat{\ell}_k. \quad (6.2)$$

Более того, подобные соотношения существуют для любой векторной величины $\hat{\mathbf{A}}$ (мы проверяли это для случаев, когда $\mathbf{A} = \mathbf{r}$, \mathbf{p} или \mathbf{L}):

$$[\hat{\ell}_i, \hat{A}_j] = ie_{ijk}\hat{A}_k. \quad (6.3)$$

Эти соотношения описывают преобразования компонент векторов при бесконечно малых поворотах вокруг осей z , x и y соответственно. Поэтому говорят, что $\hat{\ell}_i$ (\hat{L}_i) — генераторы (*неабелевой*) группы вращений $O(3)$ (или — что то же $SU(2)$). В частности, $\hat{\ell}_3 \equiv \hat{\ell}_z$ — генератор вращения вокруг оси z .

Некоммутативность компонент оператора момента — генераторов группы пространственных вращений — можно проиллюстрировать хорошо известным классическим примером. Рассмотрим два разных движения из некоторой точки A . Сместившись сначала на $l_1 = 200$ км на восток, а затем — на $l_2 = 200$ км на юг, мы попадем в некоторую точку B . Сместившись же сначала на $l_2 = 200$ км на юг, а затем — на $l_1 = 200$ км на восток, мы попадем в другую точку B' , расположенную на расстоянии $l_1 l_2 / 2R \approx 3$ км к востоку от B (R — радиус Земли).

Отметим, что перестановочные соотношения (6.3) выполняются вне зависимости от существования реализации (6.1), для операторов суммарного момента системы частиц, для спина (см. ниже) и т. п.

§ 6.1. Следствия алгебры коммутаторов

Многие свойства момента импульса определяются только его перестановочными соотношениями (6.2). Они не зависят от существования реализации операторов в виде (6.1).

• Соотношения (6.2) показывают, что различные компоненты момента импульса не могут быть фиксированы одновременно (не измеримы одновременно); имеют место соотношения неопределенности вида

$$\Delta l_x \cdot \Delta l_y \geq \frac{|\langle l_z \rangle|}{2}. \quad (6.4)$$

Это означает, что не существует такого состояния квантовой системы, в которой трехмерный вектор момента импульса был бы сохраняющейся величиной с ненулевыми значениями всех проекций. Рассмотрим для примера диск, вращающийся вокруг оси z . Его классический момент импульса направлен строго по этой оси, а в квантовой механике можно утверждать, что момент импульса направлен вдоль оси z лишь в среднем. Существуют конечные вероятности найти диск и в состояниях с ненулевыми значениями проекций момента импульса на оси x и y .

• В то же время из (6.2) следует, что

$$[\hat{l}^2, \hat{l}_i] = 0 \quad (\hat{l}^2 \equiv \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2), \quad (6.5)$$

т. е. квадрат момента импульса и его проекция на одну из осей (например \hat{l}_z) одновременно измеримы. Мы будем искать совместные собственные векторы этих операторов, которые временно обозначим $|\Lambda, m\rangle$:

$$|\Lambda, m\rangle \Rightarrow \hat{l}^2 |\Lambda, m\rangle = \lambda |\Lambda, m\rangle; \quad \hat{l}_z |\Lambda, m\rangle = m |\Lambda, m\rangle. \quad (6.6)$$

Можно показать, что из компонент оператора момента импульса нельзя построить еще один нетривиальный оператор, коммутирующий с \hat{l}^2 и \hat{l}_z , но не выражающийся через них¹. Поэтому вектор $|\Lambda, m\rangle$ содержит полную информацию о состоянии системы. Отметим еще, что при другом выборе оси квантования $z \rightarrow z'$ новые векторы состояний $|\Lambda, m\rangle_{z'}$ получаются из $|\Lambda, m\rangle$ с помощью линейных преобразований, подобных преобразованиям координат при вращении.

□ Определим еще

$$\hat{l}_{\pm} = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y. \quad (6.7)$$

Тогда из соотношений (6.2) получается

$$[\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hat{l}_z; \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_{\pm}] = \pm\hat{l}_{\pm}; \quad (6.8)$$

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_+ \hat{l}_- + \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z = \hat{l}_- \hat{l}_+ + \hat{l}_z^2 + \hat{l}_z. \quad (6.9)$$

¹Это свойство группы трехмерных вращений $O(3)$.

Далее мы действуем тем же способом, что и при решении задачи об осцилляторе. Существенное различие состоит в том, что для осциллятора возможные собственные значения оператора $\hat{a}^+\hat{a}$ не ограничены сверху, в то время как возможные собственные значения оператора $\hat{\ell}_+\hat{\ell}_-$ ограничены сверху величиной λ .

□ Рассмотрим векторы $\hat{\ell}_\pm|\Lambda, m\rangle$. Поскольку $[\hat{\ell}^2, \hat{\ell}_\pm]=0$, то

$$\hat{\ell}^2\hat{\ell}_\pm|\Lambda, m\rangle = \hat{\ell}_\pm\hat{\ell}^2|\Lambda, m\rangle = \lambda\hat{\ell}_\pm|\Lambda, m\rangle,$$

т. е. $\hat{\ell}_\pm|\Lambda, m\rangle$ — собственные векторы оператора $\hat{\ell}^2$ с тем же собственным значением λ . С другой стороны, из соотношения $[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_\pm] = \pm\hat{\ell}_\pm$ следует, что

$$\hat{\ell}_z\hat{\ell}_\pm|\Lambda, m\rangle = \hat{\ell}_\pm\hat{\ell}_z|\Lambda, m\rangle \pm \hat{\ell}_\pm|\Lambda, m\rangle = (m \pm 1)\hat{\ell}_\pm|\Lambda, m\rangle.$$

Это означает, что $\hat{\ell}_\pm|\Lambda, m\rangle$ — собственные векторы оператора $\hat{\ell}_z$ с собственными значениями $m \pm 1$:

$$\hat{\ell}_\pm|\Lambda, m\rangle = c_{\lambda m}^\pm|\Lambda, m \pm 1\rangle. \quad (6.10)$$

Поэтому $\hat{\ell}_+$ и $\hat{\ell}_-$ — *повышающий и понижающий операторы* соответственно.

□ Поскольку операторы $\hat{\ell}_i$ эрмитовы, то средние значения операторов $\hat{\ell}_x^2$ и $\hat{\ell}_y^2$ не отрицательны (ср. задачу 1.15). Следовательно, среднее $\langle|\hat{\ell}_z^2|\rangle$ по любому состоянию не превышает $\lambda = \langle|\hat{\ell}^2|\rangle$. Поэтому при заданном λ существует наибольшее значение m , обозначим его ℓ . Как и в случае с действием оператора уничтожения на основное состояние осциллятора, из определения ℓ следует, что $\hat{\ell}_+|\Lambda, \ell\rangle = 0$. С учетом этого из (6.9) получается

$$(\hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2 - \hat{\ell}_z)|\Lambda, \ell\rangle = \hat{\ell}_-\hat{\ell}_+|\Lambda, \ell\rangle = 0, \text{ т. е.}$$

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

Теперь мы перейдем к обычно используемым обозначениям — заменим символ Λ в $|\Lambda, m\rangle$ на ℓ , т. е. будем писать $|\ell, m\rangle$ взамен $|\Lambda, m\rangle$:

$$\hat{\ell}^2|\ell, m\rangle = \ell(\ell + 1)|\ell, m\rangle; \quad \hat{\ell}_z|\ell, m\rangle = m|\ell, m\rangle. \quad (6.11)$$

В силу (6.10), $(\hat{\ell}_-)^k|\ell, \ell\rangle \propto |\ell, \ell - k\rangle$. Увеличивая k , мы придем к наименьшему собственному значению $\hat{\ell}_z$, равному $-\ell$. Поэтому

$$\boxed{2\ell \text{ — целое число.}} \quad (6.12)$$

Полное же число состояний с различными ℓ_z при фиксированном значении ℓ есть, очевидно, $2\ell + 1$.

Соотношение (6.11) означает, что даже в состоянии с наибольшим значением проекции момента на ось z , при $m = \ell$, квадрат длины вектора момента больше ℓ_z^2 , т. е. $\ell_x^2, \ell_y^2 \neq 0$. Этот факт нетрудно понять с помощью соотношения неопределенностей (6.4). В состоянии $|\ell, m\rangle$ средние значения проекций момента на оси x и y — нули, т. е., например, $\ell_x = \Delta\ell_x$. Из симметрии задачи ясно, что $\Delta\ell_x = \Delta\ell_y$. Поэтому равенство $\langle\ell_x^2\rangle + \langle\ell_y^2\rangle + \langle\ell_z^2\rangle = \ell(\ell + 1)$ для состояния $|\ell, \ell\rangle$ означает, что $\langle\ell_x^2\rangle = \ell/2$, и произведение $\Delta\ell_x\Delta\ell_y$ тоже равно $\ell/2$ — в соответствии с выписанным соотношением неопределенностей. Иными словами, в состоянии $|\ell, \ell\rangle$ реализуется минимально допустимый соотношением неопределенностей разброс проекций момента на оси x и y .

• **Четность собственных состояний момента**

При отражении координат компоненты радиуса-вектора и импульса меняют знак, $\mathcal{P}\mathbf{r} = -\mathbf{r}$; $\mathcal{P}\mathbf{p} = -\mathbf{p}$. Такие векторы называют *полярными* (или просто векторами). Полярным вектором является, например, и вектор электрического поля E .

В то же время, согласно определению (6.1), компоненты вектора момента импульса при отражении не меняют знак:

$$\mathcal{P}L_i = L_i, \text{ или } [\mathcal{P}, L_i] = 0. \quad (6.13)$$

Поэтому существуют общие собственные состояния оператора пространственного отражения $\hat{\mathcal{P}}$ и операторов $\hat{\ell}^2$ и $\hat{\ell}_z$. Именно они были найдены выше. Иными словами, **состояния $|\ell, m\rangle$ имеют определенную четность; состояния $|\ell, m\rangle$, различающиеся лишь проекцией m момента на ось z , имеют одинаковую четность.**

Векторы, координаты которых не меняются при отражении, называют *аксиальными* (или псевдовекторами). Помимо момента импульса, аксиальным вектором является также и вектор магнитного поля B .

В гамильтониан (скаляр в трехмерном галилеевом мире) могут входить в качестве слагаемых скалярные произведения двух полярных векторов, например (\mathbf{pA}) , или двух аксиальных векторов, например (\mathbf{LB}) , но не может входить скалярное произведение полярного и аксиального векторов (это *псевдоскаляр*, который меняет знак при отражении).

• **Матричные элементы ℓ_{\pm} , ℓ_x , ℓ_y**

Усреднение (6.9) по состояниям $|\ell, m\rangle$ с учетом соотношения (6.10) дает цепочку равенств:

$$\begin{aligned} \langle \ell, m | \hat{\ell}^2 | \ell, m \rangle &\equiv \ell(\ell + 1) = \\ &= \langle \ell, m | \hat{\ell}_- \hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_z^2 + \hat{\ell}_z | \ell, m \rangle = \langle \ell, m | \hat{\ell}_- \hat{\ell}_+ | \ell, m \rangle + m + m^2 = \\ &= \langle \ell, m | \hat{\ell}_- | \ell, m + 1 \rangle \langle \ell, m + 1 | \hat{\ell}_+ | \ell, m \rangle + m^2 + m \Rightarrow \\ &\Rightarrow |\langle \ell, m + 1 | \hat{\ell}_+ | \ell, m \rangle|^2 = \ell^2 + \ell - m^2 - m. \end{aligned}$$

Если еще потребовать, чтобы матричные элементы были положительными числами, то отсюда получается

$$\langle \ell, m + 1 | \hat{\ell}_+ | \ell, m \rangle = \sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} \quad (6.14a)$$

и эрмитово сопряженное равенство (со сдвигом m на 1)

$$\langle \ell, m - 1 | \hat{\ell}_- | \ell, m \rangle = \sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)}. \quad (6.14b)$$

Теперь матричные элементы $\hat{\ell}_x$ и $\hat{\ell}_y$ определяются так же, как матричные элементы операторов \hat{x} и \hat{p} для осциллятора, с помощью соотношений $\hat{\ell}_x = (\hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_-)/2$, $\hat{\ell}_y = (\hat{\ell}_+ - \hat{\ell}_-)/(2i)$.

• Заметим, что векторы состояний $|\ell, m\rangle$ реализуют базис $2\ell + 1$ -мерного представления группы вращений.

6.1.1. Состояния с заданным моментом, $\ell = 1$

Рассмотрим в качестве примера состояния с моментом импульса $\ell = 1$ в ℓ_z -представлении. Будем изображать базисные состояния этого представления в виде

столбцов, опуская в обозначении волнового вектора обозначение $\ell = 1$

$$|m=1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |m=0\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |m=-1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.15)$$

Произвольное состояние — суперпозиция этих базисных. Сопряженные векторы состояний изображаются соответствующими строками.

Рассматривая соотношения (6.6), (6.14) как выражения для элементов матриц операторов $\hat{\ell}_i$ в базисе (6.15), запишем теперь выражения для этих операторов в матричной форме (наподобие представлений операторов координат и импульса для осциллятора (4.14)):

$$\ell_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \ell_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.16)$$

$$\ell_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Этот набор матриц можно рассматривать как базис трехмерного *присоединенного* представления группы вращения в пространстве матриц.

Собственные значения каждого из операторов-матриц $\hat{\ell}_x, \hat{\ell}_y$, очевидно, таковы же, как и собственные значения оператора $\hat{\ell}_z$, это ± 1 и 0 . Поэтому все матрицы (6.16) удовлетворяют уравнению

$$\hat{\ell}_i^3 = \hat{\ell}_i \quad (\text{при } \ell = 1). \quad (6.17)$$

(Это соотношение можно проверить и прямым вычислением.)

◇ Разумеется, именно матричное представление (6.16) имеет место лишь для $\ell = 1$. Для более высоких значений момента векторы состояний содержат $2\ell + 1$ компонент, отвечающих всем $2\ell + 1$ различным возможным проекциям момента, и матрицы операторов момента становятся $(2\ell + 1) \times (2\ell + 1)$ -мерными. Взамен (6.17) соответствующее уравнение для матриц — компонент момента при полном моменте ℓ_0 имеет вид

$$\hat{\ell}_i (\hat{\ell}_i^2 - 1) (\hat{\ell}_i^2 - 4) \dots (\hat{\ell}_i^2 - \ell_0^2) = 0 \quad (\text{при } \ell = \ell_0). \quad (6.18)$$

§ 6.2. Следствия координатной записи

При описании состояний отдельной частицы полезно иметь запись собственных состояний момента импульса в сферических координатах частицы r, θ, ϕ . Переход к этим координатам от прямоугольных $x = r \sin \theta \cos \phi, y = r \sin \theta \sin \phi, z = r \cos \theta$ совершается по стандартным правилам дифференцирования. В частности, например, обозначая $\rho^2 = x^2 + y^2$, имеем

$$\frac{\hat{p}_y}{-i\hbar} \equiv \frac{\partial}{\partial y} = \frac{y}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{yz}{r^2 \rho} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{x}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \phi}.$$

После простых преобразований получается

$$\begin{aligned}\hat{\ell}_z &= -i \frac{\partial}{\partial \phi}; \quad \hat{\ell}_{\pm} = e^{\pm i \phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i c t g \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right); \\ \hat{\ell}^2 &= - \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right].\end{aligned}\quad (6.19)$$

Обозначим через n_i компоненты вектора \mathbf{r}/r ,

$$n_z = \cos \theta, \quad n_x = \sin \theta \cos \phi, \quad n_y = \sin \theta \sin \phi, \quad n_{\pm} = n_x \pm i n_y \equiv \sin \theta e^{\pm i \phi}. \quad (6.20a)$$

Они образуют базис *векторного представления группы вращений трехмерного пространства*. Нетрудно проверить, что n_{\pm} и n_z — собственные функции $|\ell, m\rangle$, отвечающие собственным значениям $\ell = 1$ и $\ell_z = m = \pm 1$ и 0 соответственно. Действительно (сравните еще с (6.8)),

$$\begin{aligned}\hat{\ell}^2 n_{z,\pm} &= 2n_{z,\pm}, \quad \hat{\ell}_z n_{\pm} = \pm n_{\pm}, \quad \hat{\ell}_z n_z = 0; \\ \hat{\ell}_+ n_+ &= 0, \quad \hat{\ell}_+ n_z = n_+, \quad \hat{\ell}_+ n_- = 2n_z, \\ \hat{\ell}_- n_+ &= -2n_z, \quad \hat{\ell}_- n_z = -n_-, \quad \hat{\ell}_- n_- = 0.\end{aligned}\quad (6.20b)$$

◆ Найдем теперь нормированные собственные функции оператора момента импульса $\langle \theta, \phi | \ell, m \rangle \equiv Y_{\ell, m}(\theta, \phi)$ для любых ℓ , их называют *сферическими гармониками* (*сферическими функциями*). (Они реализуют базис $2\ell + 1$ -мерного представления группы вращений.)

◇ Собственные функции оператора $\hat{\ell}_z$, $\varphi_m(\phi)$ — это решения уравнения $\hat{\ell}_z \varphi_m \equiv -i \cdot \partial \varphi_m / \partial \phi = m \varphi_m$. Они имеют вид: $\varphi_m(\phi) = (2\pi)^{-1/2} \cdot e^{im\phi}$. Требование однозначности этих функций при вращении на угол 2π можно записать в виде $\varphi_m(\phi + 2\pi) = \varphi_m(\phi)$. Отсюда следует, что реализуются только целочисленные собственные значения m (сравните с (6.12)):

$$\varphi_m(\phi) = \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \Rightarrow \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (6.21)$$

◇ В итоге сферические гармоники можно представить в факторизованном виде $Y_{\ell, m} = P_{\ell, m}(\theta) \cdot \varphi_m(\phi)$. Чтобы найти зависимость от полярного угла θ (функции $P_{\ell, m}(\theta)$), начнем с наибольшего значения проекции момента $m = \ell$. Используем уравнение $\hat{\ell}_+ \psi_{\ell\ell} = 0$:

$$\begin{aligned}e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cdot c t g \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) e^{i\ell\phi} P_{\ell\ell}(\theta) &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{\partial}{\partial \theta} P_{\ell\ell} &= \ell \cdot c t g \theta P_{\ell\ell} \Rightarrow P_{\ell\ell} \propto \sin^{\ell} \theta.\end{aligned}$$

Тем же способом получается и $P_{\ell, -\ell} \propto \sin^{\ell} \theta$. В стандартной нормировке

$$Y_{\ell, \pm\ell} = (\mp i)^{\ell} \sqrt{\frac{(2\ell + 1)!}{4\pi}} \cdot \frac{n_{\pm}^{\ell}}{2^{\ell} \ell!}. \quad (6.22a)$$

Остальные функции получаются из $Y_{\ell,\ell}$ действием оператора $(\hat{\ell}_-)^k$:

$$Y_{\ell,\ell-k} \propto (\hat{\ell}_-)^k Y_{\ell,\ell}, \quad Y_{\ell,-\ell+k} \propto (\hat{\ell}_+)^k Y_{\ell,-\ell}. \quad (6.22б)$$

Соотношения (6.20б) вместе с (6.14) позволяют выразить эти функции через компоненты единичного вектора n_i . Так,

$$Y_{\ell,\pm(\ell-1)} = (\mp i)^{\ell-1} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{8\pi\ell}} \cdot \frac{n_{\pm}^{\ell-1} n_z}{2^{\ell-1}(\ell-1)!}. \quad (6.22в)$$

$$\text{В частности, } Y_{1,0} = i\sqrt{3/(4\pi)} \cdot n_z, \quad \bar{Y}_{1,\pm 1} = \mp i\sqrt{3/(8\pi)} \cdot n_{\pm}. \quad (6.22г)$$

Функции $Y_{\ell,m}$ часто записывают через присоединенные функции Лежандра $P_{\ell m}(\cos \theta)$:

$$Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = (i)^{\ell+m+|m|} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell+|m|)!}{(\ell-|m|)!}} \cdot P_{\ell m}(\cos \theta) e^{im\phi}. \quad (6.23)$$

Заметим, что $Y_{\ell,-m} = (-1)^{\ell-m} Y_{\ell,m}^*$ и $Y_{0,0} = 1/\sqrt{4\pi}$.

Приведем для справок явные выражения сферических функций с небольшими ℓ (здесь $c = \cos \theta$, $s = \sin \theta$)

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; & Y_{10} &= i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}c, & Y_{11} &= i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}se^{i\phi}; \\ Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(1-3c^2), & Y_{21} &= \pm\sqrt{\frac{15}{8\pi}}cse^{i\phi}, & Y_{22} &= -\sqrt{\frac{15}{32\pi}}s^2e^{2i\phi}; \\ & & Y_{\ell,-m} &= Y_{\ell,m}^*. \end{aligned} \quad (6.24)$$

• **Отражение** координат $\mathcal{P}\mathbf{r} = -\mathbf{r}$ означает $r \rightarrow r$, $\theta \rightarrow \pi - \theta$, $\phi \rightarrow \phi + \pi$. Нетрудно проверить, что собственные функции состояний $|\ell, \pm\ell\rangle$ (6.22а) при таком преобразовании умножаются на $(-1)^\ell$. А поскольку операторы ℓ_{\pm} сохраняют четность, то и для любых значений m имеем $Y_{\ell,m}(-\mathbf{r}) = (-1)^\ell Y_{\ell,m}(\mathbf{r})$. Это означает, что четность состояния с определенным значением орбитального момента ℓ есть $(-1)^\ell$,

$$\mathcal{P}|\ell, m\rangle = (-1)^\ell |\ell, m\rangle. \quad (6.25)$$

Это соотношение, как и выражение (6.21), справедливо только в случае, когда оператор момента импульса связан с координатами соотношениями (6.19). Связь между моментом импульса и четностью (6.25) может не иметь места, например, для суммарного момента нескольких электронов (электроны одного атома или иона). В этом случае собственные функции полного момента импульса продолжают оставаться собственными функциями оператора пространственного отражения, т. е. имеют определенную четность, но соотношение (6.25) не выполняется.

§ 6.3. Вращение координат

Оператор вращения на конечный угол определяется подобно тому, как это было сделано в § 1.7 для оператора конечного сдвига (1.24). Для вращения на угол α относительно оси \mathbf{n} этот оператор имеет вид¹

$$\hat{U}_n(\alpha) = e^{i\alpha \mathbf{L}\mathbf{n}/\hbar}. \quad (6.26)$$

В частности, оператор вращения вокруг оси z можно записать в виде $e^{i\alpha\partial/\partial\phi}$ — в полной аналогии с (1.24). Как и в одномерном случае, это влечет за собой выражение (6.19) для z -компоненты момента импульса.

Вращения вокруг осей x и y не сводятся к простым сдвигам полярных координат θ и ϕ . Поэтому записанные в сферических координатах выражения для операторов конечных вращений вокруг этих осей и сами проекции оператора момента импульса выглядят сложнее. Тем не менее, использование выражений (6.19), (6.26) позволяет определить, как меняются выражения ранее определенных сферических функций при переходе к новым направлениям осей.

Другой способ использования соотношений (6.26) применим для описания вращений в состоянии с определенным значением момента импульса. Опишем этот способ на примере состояний с $\ell = 1$ в ℓ_z -представлении, которые мы изображаем в виде суперпозиции столбцов (6.15). В этом случае операторы проекций момента импульса имеют вид (6.16), и вычисление сводится к простой матричной алгебре. С учетом уравнения (6.17) матрица оператора конечного вращения (6.26) принимает вид

$$\hat{U}_n(\alpha) = 1 - \hat{\ell}_n^2(1 - \cos \alpha) + i\hat{\ell}_n \sin \alpha \quad \text{при } \ell = 1. \quad (6.27)$$

§ 6.4. Задачи

1. В соответствии с правилом построения операторов по классическим величинам, выписанным перед (1.5), оператор момента импульса следовало бы писать в симметризованной форме, $\hat{L} \rightarrow (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{r}})/2$. Покажите, что в данном случае такая операция не дает ничего нового.
2. Найти средние значения операторов L_x^2 и L_y^2 в состоянии $|\ell, m\rangle$. Можно ли одновременно измерить эти величины?
3. Найти средние значения операторов $\ell_x, \ell_y, \ell_z, \ell_x\ell_y, \ell_z\ell_x, \ell_x^2, \ell_y^2, \ell_z^2$ и направление вектора \mathbf{L} в состояниях
 - $|\ell, m\rangle$, в частности, в состоянии $|\ell, \ell\rangle$,
 - $(|1, 1\rangle + e^{i\alpha}|1, -1\rangle)/\sqrt{2}$,
 - $(|1, 1\rangle + e^{i\alpha}|1, 0\rangle)/\sqrt{2}$.
 Как зависит направление вектора \mathbf{L} от угла α ?
4. Используя соотношения (6.2), выясните, при каких m, m' будет $\langle m|x_i|m'\rangle \neq 0$; $\langle m|x_i x_j|m'\rangle \neq 0$.

¹Мы не рассматриваем здесь общего вращения координат, которое можно описать как последовательность трех «элементарных» вращений (см. например, [1], [13]).

5. Найти $\langle \ell_z \rangle$ и вероятности различных значений проекции момента на ось z в состояниях $\psi(\phi) =$ (I) $A \cos^2 \phi$, (II) $C \cdot e^{i\phi} \cos^2 \phi$, (III) $B(1 + \cos \phi)$. Как меняются со временем средние значения $\langle \ell_z \rangle$ в случае плоского ротатора $\hat{H} = \hat{L}_z^2/2I$?
6. Пусть m — проекция момента на ось z , а ось z' повернута под углом α к оси z . В состоянии $|\ell, m\rangle$ найти вероятности разных значений $\ell_{z'}$ и средние $\langle \hat{\ell}_{z'} \rangle$, $\langle \hat{\ell}_{z'}^2 \rangle$.
7. Пусть операторы \hat{b} и \hat{b}^+ имеют перестановочные соотношения (4.4) (такие же, как для гармонического осциллятора). Покажите, что операторы $\hat{\ell}_- = \sqrt{2\ell - \hat{b}^+ \hat{b}} \cdot \hat{b}$, $\hat{\ell}_+ = \hat{b}^+ \sqrt{2\ell - \hat{b}^+ \hat{b}}$ обладают теми же перестановочными соотношениями, что и операторы компонент момента импульса (6.7). Найти соответствующий оператор $\hat{\ell}_z$.
8. С помощью уравнения (6.18) получите обобщение представления (6.27) при произвольном значении ℓ .

Глава 7

ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОЕ ПОЛЕ

§ 7.1. Задача двух тел. Общие свойства

Задача двух тел, взаимодействие которых зависит только от расстояния между ними, описывается гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|).$$

Для описания движения пары частиц удобно ввести координаты и импульс центра масс \hat{R} и \hat{P} и относительного движения \hat{r} и \hat{p} (и соответствующие массы M и m):

$$\begin{aligned} \hat{R} &= \frac{m_1 \hat{r}_1 + m_2 \hat{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \hat{P} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2, \quad M = m_1 + m_2, \\ \hat{r} &= \hat{r}_1 - \hat{r}_2, \quad \hat{p} = \frac{m_2 \hat{p}_1 - m_1 \hat{p}_2}{m_1 + m_2}, \quad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \end{aligned} \quad (7.1a)$$

Перестановочные соотношения между операторами координат и импульса каждого из этих движений таковы же, как и для отдельной частицы (1.20):

$$[\hat{P}_i, \hat{R}_j] = -i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{p}_i, \hat{r}_j] = -i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{p}_i, \hat{R}_j] = [\hat{P}_i, \hat{r}_j] = 0. \quad (7.1b)$$

Движения двух тел по отдельности входят только в выражение для кинетической энергии. В свою очередь, операторы импульсов разных частиц коммутируют друг с другом. Поэтому — в точности, как в классической механике — эта кинетическая энергия, а вслед за ней и гамильтониан разбиваются на сумму гамильтониана движения центра масс \hat{H}_R и гамильтониана относительного движения \hat{H}_r ,

$$\hat{H} = \hat{H}_R + \hat{H}_r, \quad \hat{H}_R = \frac{\hat{P}^2}{2M}, \quad \hat{H}_r = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r).$$

◇ Движение центра масс (атома в целом) — свободное, оно описывается обычными плоскими волнами.

◇ Относительное движение описывается как движение частицы с приведенной массой m в поле $U(r)$ центра, расположенного в начале координат. Нетрудно проверить, что коммутаторы операторов $\hat{\mathbf{p}}$ и $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2$ для относительного движения таковы же, как и для движения одной частицы. Именно поэтому можно рассматривать относительное движение как движение частицы в поле силы, зависящей только от расстояния до центра. Это и делается ниже.

• Если $U(r)$ не зависит от направления, то гамильтониан коммутирует с компонентами оператора момента импульса, которые друг с другом не коммутируют:

$$[\hat{\ell}_i, \hat{H}] = 0, \quad [\hat{\ell}_i, \hat{\ell}_j] = i\epsilon_{ijk}\ell_k. \quad (7.2)$$

Поэтому, в силу теоремы (2.12), стационарные состояния вырождены. В силу той же коммутативности, существуют общие собственные функции гамильтониана и операторов $\hat{\ell}^2$ и $\hat{\ell}_z$. Это означает, что при отыскании таких функций должен работать метод разделения переменных.

Для детального описания здесь удобны сферические координаты, в них уравнение Шредингера имеет вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hbar^2 \Delta_{\theta, \phi}}{2mr^2} + U(r) \right] \psi(r, \theta, \phi) = E\psi(r, \theta, \phi).$$

Здесь $\Delta_{\theta, \phi}$ — угловая часть оператора Лапласа. Она совпадает с оператором $-\hat{l}^2$ (6.19). Первый член отвечает квадрату оператора радиального импульса \hat{p}_r^2 . Однако этот оператор не выражается через радиус-вектор r как $-i\hbar(\partial/\partial r)$, и — в отличие от классического случая — радиальная часть лапласиана не является квадратом какого-нибудь «естественного» оператора.

Разделяя переменные, т. е. записав $\psi = R(r)Z(\theta, \phi)$, мы воспользуемся для угловой части Z найденными выше решениями задачи на собственные значения

$$\hat{\ell}^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell + 1)Y_{\ell m}(\theta, \phi).$$

В итоге волновая функция принимает вид¹

$$\psi = R_{\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad (7.3)$$

и для радиальной функции получается уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R_{E\ell} + U_{eff} R_{E\ell} = E_{\ell} R_{E\ell}, \quad (7.4a)$$

$$U_{eff} = U(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2mr^2}; \quad r > 0.$$

Вопреки ожиданиям, это уравнение не выглядит похожим на одномерное уравнение Шредингера. Однако оно принимает вид обычного одномерного уравнения Шредин-

¹ Величину U_{eff} называют обычно *эффективным потенциалом*, а входящую в него величину $\hbar^2 \ell(\ell + 1)/(2mr^2)$ — *центробежным потенциалом*.

гера с зависящим от ℓ потенциалом $U_{eff}(r)$ для функции $\chi_{E\ell} = rR_{E\ell}$,

$$-\frac{d^2\chi_{E\ell}}{dr^2} + \frac{2mU_{eff}(r)}{\hbar^2}\chi_{E\ell} = k^2\chi_{E\ell} \quad \left(k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \chi_{E\ell} = rR_{E\ell}\right) \quad (7.4б)$$

с обычным по виду условием нормировки в дискретном спектре

$$\int_0^\infty |R_{E\ell}|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |\chi_{E\ell}|^2 dr = 1. \quad (7.4в)$$

Условие конечности $R_{E\ell}(r)$ в нуле выглядит как граничное условие

$$\chi_{E\ell}(r=0) = 0. \quad (7.4г)$$

Ниже мы нередко будем использовать значок k вместо E в обозначении радиальных функций.

• В одномерном случае в поле притяжения $U(x \rightarrow \pm\infty) = 0$ всегда существовал хотя бы один дискретный уровень энергии. В трехмерном случае это не так. Граничное условие (7.4г) «выталкивает» уровень. Если потенциал сосредоточен в области размера a , где его характерное значение составляет \tilde{V} ,

$$\boxed{\text{дискретные уровни не существуют, если } |\tilde{V}| < \hbar^2/(2ma^2)}. \quad (7.5)$$

Иными словами, для существования дискретного уровня необходимо, чтобы абсолютное значение средней характерной потенциальной энергии в области локализации потенциала было больше кинетической энергии, необходимой для локализации внутри этого объема.

♦ Собственные значения энергии нумеруются, начиная с наименьшего. Поэтому — по определению — с ростом n_r при фиксированном ℓ энергия состояния возрастает.

♦ Используем правило дифференцирования энергии по параметру (5.11):

$$\frac{\partial E_{n_r, \ell}}{\partial \ell} = \langle n_r, \ell | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \ell} | n_r, \ell \rangle = \langle n_r, \ell | \frac{\hbar^2(2\ell+1)}{2mr^2} | n_r, \ell \rangle \geq 0. \quad (7.6)$$

Это означает, в частности, что в центрально-симметричном поле с ростом ℓ при фиксированном n_r энергия возрастает.

▼ **Поведение при $r \rightarrow 0$.** Пусть $r^2 U(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$. Тогда при малых r в радиальном уравнении (7.4б) остается только центробежный член, и оно принимает вид $\chi_{k\ell}'' = \ell(\ell+1)\chi_{k\ell}/r^2$. Его решение можно искать в виде $\chi_\ell = r^a$, и уравнение принимает вид $a(a-1) = \ell(\ell+1)$, т. е. его решения имеют вид $R_{k\ell} = \chi_{E\ell}/r \sim r^\ell$ и $R_{k\ell} = \chi_{E\ell}/r \sim r^{-\ell-1}$. В итоге

$$R_{E\ell} \rightarrow r^\ell \text{ или } \rightarrow r^{-(\ell+1)} \text{ при } r \rightarrow 0. \quad (7.7)$$

Второе решение не удовлетворяет граничному условию, обычно оно отбрасывается. Отметим, что $\psi(0) \neq 0$ лишь для $\ell = 0$.

▼ **Поведение при $r \rightarrow \infty$.** Если поле убывает с расстоянием достаточно быстро, то при $r \rightarrow \infty$ можно пренебречь эффективным потенциалом, и уравнение Шредингера (7.4б) принимает вид $\chi_{k\ell}'' = -k^2 \chi_{k\ell}$. Поэтому

$$\begin{aligned} R_{E\ell} &\sim \frac{\sin(kr + \alpha)}{r} && \text{при } E > 0 \left(k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \right), \\ R_{E\ell} &\sim \frac{e^{-\kappa r}}{r} && \text{при } E < 0 \left(\kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \right). \end{aligned} \quad (7.8)$$

• **Терминология.** Величину ℓ называют *орбитальным* квантовым числом, а m — *магнитным*. Состояния, отвечающие значениям $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$ обозначают буквами s, p, d, f, \dots , соответственно. *Радиальным квантовым числом* называют число нулей n_r функции $R_\ell(r)$. *Главным квантовым числом* называют число $n = n_r + \ell + 1$.

▽ В дальнейшем мы будем обозначать состояния атомных систем значком $|N\rangle$, понимая под N набор квантовых чисел n_r, ℓ, m и другие возможные квантовые числа, появляющиеся при описании более сложных систем.

▽ **Вырождение.** Гамильтониан коммутирует со всеми компонентами момента импульса, а они не коммутируют друг с другом. Согласно (2.12), это приводит к вырождению. В общем случае состояния в центрально-симметричном поле вырождены $2\ell + 1$ -кратно.

§ 7.2. Поле, быстро убывающее с расстоянием

В большинстве физически интересных случаев взаимодействие быстро убывает с расстоянием и, начиная с некоторого расстояния R_0 , движение можно считать свободным. Если к тому же $kR_0 \ll 1$, то при $r > R_0$ реализуются обе рассмотренные выше асимптотические возможности, а требование обращения $\chi_\ell(r)$ в ноль при $r \rightarrow 0$ для решения в этой области перестает быть обязательным. Мы и разберем сейчас такое «свободное» движение.

При $\ell = 0$ уравнение Шредингера имеет вид $\chi'' + k^2 \chi = 0$. Выберем два независимых решения этого уравнения (нормированных на δ -функцию по шкале k):

$$\begin{aligned} R_{k0}^s(r) &\equiv \frac{\chi_k^s(r)}{r} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin kr}{r}, & R_{k0}^c(r) &\equiv \frac{\chi_k^c(r)}{r} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\cos kr}{r}, \\ & & & (\int \chi_k \cdot \chi_p dr = \delta(k - p)). \end{aligned} \quad (7.9)$$

При $\ell \neq 0$ выделим из $R_{k\ell}$ множитель r^ℓ (поведение при малых r) $R_{k\ell} = r^\ell \phi_\ell(r)$. Тогда уравнение Шредингера (7.4б) примет вид

$$\phi_\ell'' + 2(\ell + 1)\phi_\ell'/r + k^2 \phi_\ell = 0.$$

Продифференцируем это уравнение по r и подставим сюда $f(r) = \phi_\ell'/r$. Получившееся уравнение совпадает с уравнением для $\phi_{\ell+1}$. Это означает, что $\phi_{\ell+1} \propto f(r) = (1/r)(d\phi_\ell/dr)$. Решая это рекуррентное соотношение, найдем (ниже

еще восстановлена нормировка)

$$\begin{aligned} R_{k\ell}^s(r) &= \left(\frac{r}{k}\right)^\ell \left(-\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin kr}{r}\right), \\ R_{k\ell}^c(r) &= \left(\frac{r}{k}\right)^\ell \left(-\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\cos kr}{r}\right). \end{aligned} \quad (7.10a)$$

Эти решения выражаются через функции Бесселя и Неймана $J_\alpha(x)$ и $N_\alpha(x)$,

$$R_{k\ell}^s(r) = \sqrt{\frac{k}{r}} J_{\ell+1/2}(kr), \quad R_{k\ell}^c(r) = \sqrt{\frac{k}{r}} N_{\ell+1/2}(kr). \quad (7.10b)$$

(Для свободного движения $\chi(0) = 0$, остается только решение R^s .)

◇ Проверим, что асимптотики этих решений совпадают с (7.7) и (7.8).

▽ При $kr \ll 1$ функция $\sin(kr)/r$ раскладывается в ряд по степеням r^2 , и дифференцирование $[(1/r)d/dr]^\ell$ «убивает» ℓ первых членов этого ряда, оставляя константу. В итоге $R_{k\ell}^s \propto r^\ell$. Точно так же в «косинусном» решении $\cos(kr)/r \sim 1/r$ при малых r . Дифференцирования превращают $1/r$ в $r^{-(2\ell+1)}$. В итоге при $kr \rightarrow 0$ имеем в соответствии с (7.7)

$$R_{k\ell}^s \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{k(kr)^\ell}{(2\ell+1)!!}; \quad R_{k\ell}^c \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{(2\ell+1)!!}{r(kr)^\ell}.$$

▽ При $kr \gg 1$ имеет место соотношение

$$-\frac{d}{dr} \left[\frac{\sin(kr + \alpha)}{r} \right] \rightarrow k \frac{\sin(kr + \alpha - \pi/2)}{r} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right),$$

т. е. в этом пределе «выживает» только первый член и каждое дифференцирование сдвигает аргумент синуса или косинуса на $\pi/2$. В итоге

$$R_{k\ell}^s \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(kr - \ell\pi/2)}{r}, \quad R_{k\ell}^c \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\cos(kr - \ell\pi/2)}{r}. \quad (7.11)$$

Обычно поле быстро убывает с расстоянием, при больших r движение практически свободное, и волновая функция есть суперпозиция решений (7.10). Коэффициенты этой суперпозиции определяются из решения соответствующего радиального уравнения Шредингера в окрестности начала координат с граничным условием конечности $R_{k\ell}$ при $r \rightarrow 0$. При $kr \gg 1$ это решение записывают в виде суперпозиции асимптотик (7.11):

$$\boxed{R_{k\ell}(r) \sim \frac{\sin(kr - \ell\pi/2 + \delta_\ell)}{r}}. \quad (7.12)$$

Возникший здесь сдвиг фаз δ_ℓ называют еще *фазой рассеяния*. Свойства этой фазы обсуждаются в частности при изучении метода парциальных волн в задаче рассеяния § 15.4.

□ Пример решения радиального уравнения дает нам компьютерное моделирование, обсуждаемое в § 17.1.4.

◆ *Квазиклассическое приближение для $R_{n\ell}(r)$.*

Для $\ell = 0$ центробежная энергия $\hbar^2\ell(\ell+1)/(2mr^2)$ отсутствует, и получается одномерная задача на полупрямой (с условием $\chi(0) = 0$).

Для $\ell \neq 0$ в условии применимости квазиклассического приближения входит U_{eff} , а не U . Для малых r это сводится к условию $\ell \gg 1$. Можно показать, что правильная асимптотика $R(r)$ получается, если в выражении для U_{eff} заменить $\ell(\ell+1)$ на $(\ell+1/2)^2$. (Это обусловлено тем, что при малых r поведение U_{eff} вблизи точки поворота заметно отличается от случая однородного поля, который использовался при выводе квазиклассических условий квантования.) Напомним, что за счет центробежного члена обе точки поворота расположены при $r \neq 0$.

§ 7.3. Кулоновская задача. Атом водорода

Описание строения атома — важнейшая задача квантовой механики. Для всех атомов такое описание строится по образцу того, что удастся сделать для простейшего атома — атома водорода с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}. \quad (7.13)$$

Мы рассмотрим только связанные состояния, $E < 0$.

Естественные для задачи единицы это — постоянная тонкой структуры α , боровский радиус a_B , и характерное значение энергии — Ридберг R_y :

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}, \quad a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} \equiv \frac{\hbar}{mc\alpha} = 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ см}, \quad (7.14)$$

$$R_y = \frac{e^2}{2a_B} \equiv \frac{me^4}{2\hbar^2} \equiv \frac{mc^2\alpha^2}{2} = 13,6 \text{ эВ}.$$

Соответственно, характерные значения времени τ , «скорости» электрона v_e , электрического E_a и магнитного B_a полей на «орбите» составляют

$$\tau = \frac{\hbar}{R_y} = 2,4 \cdot 10^{-17} \text{ с}, \quad v_e = c\alpha,$$

$$E_a = \frac{R_y}{ea_B} = 2,7 \cdot 10^9 \text{ В/см}, \quad B_a = \frac{v}{c}E_a = \alpha E_a.$$

Некоторые черты качественной картины становятся понятнее, если рассмотреть зависимость эффективного потенциала U_{eff} (7.4а) от расстояния при разных ℓ . При $\ell = 0$ это — обычная кулоновская зависимость, потенциал монотонно растет от значения $U_{eff} \rightarrow -\infty$ при $r \rightarrow 0$ до $U_{eff} = 0$ при $r \rightarrow \infty$, оставаясь все время отрицательным. При $\ell \neq 0$ при $r \rightarrow 0$ доминирует центробежный член и $U_{eff} \rightarrow \infty$. С ростом r потенциал быстро падает, достигая минимума при $r_\ell = 2a_B\ell(\ell+1)$, а затем монотонно возрастает до $U_{eff} = 0$ при $r \rightarrow \infty$ (здесь начинает доминировать

кулоновское слагаемое, которое в этой области убывает с расстоянием медленнее центробежного).

♦ В безразмерных переменных $r/a_B \rightarrow r$, $E/R_y \rightarrow -\varkappa^2$ уравнение Шредингера (7.4а) принимает вид¹

$$\left(-\bar{\Delta} - \frac{2}{r}\right)\psi = -\varkappa^2\psi \Rightarrow \frac{d^2\chi_\ell}{dr^2} + \left(-\varkappa^2 + \frac{2}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)\chi_\ell = 0. \quad (7.15)$$

Нам известно поведение χ_ℓ на границах: $\chi_\ell \sim r^{\ell+1}$ при $r \rightarrow 0$ и $\chi_\ell \sim e^{-\varkappa r}$ при $r \rightarrow \infty$. Поэтому удобно искать решение в виде $\chi_\ell = r^{\ell+1}e^{-\varkappa r}\omega(r)$. Далее мы еще разложим $\omega(r)$ в ряд $\omega = \sum_0^\infty b_k(2\varkappa r)^k$. При этом получается уравнение для $\omega(r)$, а из него — рекуррентное соотношение для коэффициентов b_k :

$$r\omega'' + 2(\ell+1-\varkappa r)\omega' + 2(1-\varkappa-\varkappa\ell)\omega = 0. \\ b_{k+1} = \frac{k+\ell+1-1/\varkappa}{(k+1)(k+2\ell+2)}b_k. \quad (7.16)$$

Видно, что $b_{k+1} \rightarrow 2\varkappa b_k/(k+1)$ при $k \rightarrow \infty$. Отсюда следует, что $b_k \sim (2\varkappa)^k/k!$. Если ряд не обрывается, то при $r \rightarrow \infty$ он сходится к функции $\omega \sim e^{2\varkappa r}$, а это нарушает граничное условие (условие нормируемости волновой функции)¹. Чтобы $\chi_\ell \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, необходимо оборвать ряд на некотором $k = n_r$, при этом $n_r + \ell + 1 = 1/\varkappa$ — целое число, и $\omega(r)$ — полином степени n_r . *Радиальное квантовое число* n_r равно числу нулей функции $\omega(r)$. (Требование конечности степени полинома n_r имеет тот же смысл, что и условие обращения в ноль коэффициента при растущей экспоненте для задачи об уровнях энергии в потенциальной яме.) В дальнейших обсуждениях важнейшую роль играет *главное квантовое число* $n = n_r + \ell + 1 = 1/\varkappa$.

Получившиеся полиномы $\omega(r)$ называют функциями Лагерра $L_{n+\ell}^{2\ell+1}$. В итоге искомого нормированные собственные радиальные функции имеют вид

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad (7.17а)$$

$$R_{n\ell} = -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{[(n+\ell)!]^3}} \left(\frac{2r}{n}\right)^\ell e^{-r/n} L_{n+\ell}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{n}\right). \quad (7.17б)$$

В частности при $r \ll 1$ (см. [1]),

$$R_{n,\ell} \rightarrow r^\ell \frac{2^{\ell+1}}{n^{2+\ell}(2\ell+1)!} \sqrt{\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}}. \quad (7.17в)$$

¹Здесь $\bar{\Delta}$ — оператор Лапласа в этих безразмерных переменных.

¹При этом $\chi_\ell \propto e^{\varkappa r}$, что отвечает решению уравнения Шредингера с волновой функцией, растущей экспоненциально при $r \rightarrow \infty$. В одномерной задаче о прямоугольной яме уровень энергии определялся требованием, чтобы коэффициент при подобной экспоненте обращался в ноль. В нашей задаче критерий поиска собственного значения в сущности такой же.

Коэффициенты первых радиальных функций удобнее вычислять непосредственно с помощью соотношений (7.16). Несколько примеров можно найти в (17.23), (17.24). На рис. 7.1 изображены несколько радиальных волновых функций низших состояний атома водорода.

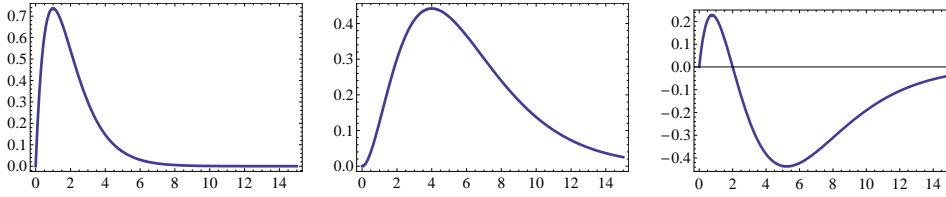


Рис. 7.1. Радиальные волновые функции $\chi_{n\ell} = rR_{n\ell}$ в атомных единицах для $(n, \ell) = (1, 0)$, $(2, 1)$ и $(2, 0)$ (слева направо).

Отметим, что при больших $n \gg \ell$, r из формул [1] легко получается

$$R_{n\ell} \approx \frac{2^{\ell+1}}{n^{3/2}(2\ell+1)!} \cdot \left(\frac{r}{n}\right)^\ell. \quad (7.18)$$

Волновые функции $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)$ описывают состояния, обозначаемые как $|n\ell m\rangle$, иначе говоря $\psi_{n\ell m} = \langle \mathbf{r} | n\ell m \rangle$. Нередко обсуждаются также состояния вне зависимости от проекции момента на ось, тогда говорят о состояниях $n\ell$, например, $4f$ — состояние с $n = 4$, $\ell = 3$, а $2p$ — состояние с $n = 2$, $\ell = 1$. Величина энергии основного состояния $|1, 0, 0\rangle$ есть $R_y = 13,6$ эВ — это минимальная энергия, которую надо сообщить находящемуся в основном состоянии электрону, чтобы он оторвался от ядра (энергия ионизации атома). Итак,

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2}, \quad (7.19)$$

$$n = n_r + \ell + 1 = 1, 2, 3, \dots, \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \dots$$

♦ **Кулоновское вырождение.** Энергии уровней атома водорода зависят только от главного квантового числа n , но не от n_r и ℓ по отдельности, как это было бы для почти любого другого сферически симметричного потенциала. Уровню E_n с данным значением n соответствует n^2 различных состояний (различных волновых функций) с $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$. Состояния с определенной энергией — суперпозиции состояний с разными ℓ уже не имеют определенной четности. Это более сильное вырождение, чем для обычной задачи с центрально-симметричным потенциалом (где имеется только вырождение по проекциям момента импульса с кратностью $2\ell + 1$). Такое сильное вырождение означает, что кулоновская задача (как и в классическом случае) обладает более высокой симметрией, чем симметрия группы трехмерных вращений $O(3)$, только и имеющая место для большинства остальных задач с центральной симметрией (см. § 7.4). Подобная повышенная симметрия имеет место и для трехмерного изотропного осциллятора, $U(r) = kr^2/2$.

Дополнительно каждое из найденных состояний двукратно вырождено из-за наличия спина у электрона (его проекция на ось z может принимать значения $+1/2$ и $-1/2$ — см. ниже), т. е. полная кратность вырождения реального атома есть $2n^2$.

• **Водородоподобные атомы** — атомы, имеющие ядро с зарядом Ze и один электрон (сильно «ободранные» ионы). Они описываются полученными выше формулами с естественным изменением масштабов величин. Для этих систем размер a_B уменьшается, а энергии состояний $|E_n|$ увеличиваются в Z^2 раз по сравнению с атомом водорода.

• Поучительно вычислить **некоторые средние величины** для водородоподобных атомов. В силу теоремы о вириале (2.8), стр. 40, для такого атома средние значения кинетической и потенциальной энергии связаны соотношением $2\langle T \rangle = -\langle U \rangle$. Таким образом,

$$\left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right\rangle_n = \left\langle \frac{Ze^2}{2r} \right\rangle_n = \frac{Z^2 R_y}{n^2}. \quad (7.20a)$$

Отсюда для среднего значения величины $1/r$ и среднеквадратичного значения скорости электрона получается при любых значениях ℓ

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_n = \frac{Z}{a_B n^2}, \quad v_n = c \frac{Z\alpha}{n}. \quad (7.20б)$$

Среднее $\langle r \rangle$ несомненно зависит от ℓ . Для $\ell = 0$ эта величина вычислена ниже, (7.22б). Соотношение (7.20б) дает грубую оценку

$$\langle r \rangle_n \sim a_B \frac{n^2}{Z}, \quad (7.20в)$$

Качество этой оценки улучшается при больших n и ℓ , когда срабатывает квазиклассическое описание (точнее см. (17.25)).

Чтобы вычислить среднее значение величины $1/r^2$, вспомним выражение для эффективного потенциала (7.4а). Если добавить сюда слагаемое $\hbar^2 \delta / (2mr^2)$ с малым коэффициентом $\delta \ll 1$, это отвечает переходу от целого ℓ к нецелой величине $\ell' \approx \ell + \delta / (2\ell + 1)$. Воспользуемся теперь правилом дифференцирования энергии по параметру (5.11), которое дает (только при малых δ) $\left\langle \frac{\hbar^2 \delta}{2mr^2} \right\rangle = \frac{\delta}{2\ell + 1} \frac{\partial E_{n\ell}}{\partial \ell}$. Вспоминая ответ (7.19) с $n = n_r + \ell + 1$, найдем

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_n = \frac{4mR_y Z^2}{\hbar^2 n^3 (2\ell + 1)} \equiv \frac{2Z^2}{n^3 (2\ell + 1) a_B^2} \equiv \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_n^2 \cdot \frac{2n}{2\ell + 1}. \quad (7.20г)$$

• Вычислим поправку к энергии атома водорода, обусловленную отличием полной релятивистской кинетической энергии от классического значения:

$$\hat{p}^2/2m \rightarrow \sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 = \hat{p}^2/2m - \hat{p}^4/8m^3 c^2 + \dots \quad (7.21a)$$

Воспользуемся соотношением $\frac{\hat{p}^2}{2m} = \hat{H}_0 + \frac{e^2}{r}$ с невозмущенным гамильтонианом атома водорода \hat{H}_0 . Тогда поправку к энергии (7.19) можно записать в виде среднего по

невозмущенным состояниям атома водорода $|n\ell m\rangle$:

$$\begin{aligned}\Delta E_r &= \langle n\ell m | \Delta_r H | n\ell m \rangle \equiv -\frac{1}{2mc^2} \left\langle n\ell m \left| \left(\hat{H}_0 + \frac{e^2}{r} \right)^2 \right| n\ell m \right\rangle \equiv \\ &\equiv -\frac{1}{2mc^2} \left\langle n\ell m \left| \left(\hat{H}_0^2 + 2\hat{H}_0 \frac{e^2}{r} + \left(\frac{e^2}{r} \right)^2 \right) \right| n\ell m \right\rangle.\end{aligned}$$

Поскольку $\hat{H}_0 |n\ell m\rangle = E_n \equiv -R_y/n^2$, то среднее значение оператора \hat{H}_0^2 есть R_y^2/n^4 . Согласно теореме о вириале (7.20a), среднее значение потенциальной энергии равно в нашем случае $2E_n$. Поэтому среднее значение произведения $2\hat{H}_0 \frac{e^2}{r}$ есть $-4E_n^2 = -4R_y^2/n^4$. Среднее значение последнего слагаемого в скобках $\left(\frac{e^2}{r}\right)^2$ вычисляется с помощью (7.20r), это есть $\frac{e^4}{n^3(\ell+1/2)a_B^2} \equiv \frac{4R_y^2}{n^3(\ell+1/2)}$. Собирая эти ответы и используя соотношение (7.14) для отношения $R_y/(mc^2)$, мы получаем

$$-\Delta E_r = \left\langle \frac{\hat{p}^4}{8m^2c^3} \right\rangle = \frac{R_y^2}{2mc^2} \left(\frac{1}{n^4} - \frac{4}{n^4} + \frac{4}{n^3(\ell+1/2)} \right) = \frac{R_y\alpha^2}{n^3} \left(\frac{1}{\ell+1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (7.21б)$$

• Примеры. Частные случаи

♦ Для состояний с $\ell = n - 1$ имеем $n_r = 0$, поэтому ω — постоянная. Отсюда получается первое выражение (17.24), которое вместе с (6.24) дает волновую функцию *основного состояния* атома водорода

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) \equiv \langle \mathbf{r} | 1, 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}. \quad (7.22a)$$

Используя соотношения (17.14), найдем, что в состоянии $|n, 0, 0\rangle$

$$\langle r \rangle = n \left(n + \frac{1}{2} \right); \quad \frac{\Delta r}{\langle r \rangle} = \frac{1}{\sqrt{2n+1}}. \quad (7.22б)$$

У основного (1s) состояния $\langle r \rangle = 3/2$, $\Delta r/\langle r \rangle = 1/\sqrt{3}$, т. е. нет ничего общего с наглядной моделью Бора, для которой $\langle r \rangle = 1$, $\Delta r = 0$ (не говоря уже о том, что в 1s-состоянии момент $L = 0$, а в модели Бора в основном состоянии $L = \hbar$). Напротив, при $\ell = m = n - 1 \gg 1$ квантовая механика дает ответ, близкий к боровской модели, ср. (7.20б). А именно, средний радиус велик $\langle r \rangle \propto n^2$, относительная дисперсия мала $\Delta r/\langle r \rangle \ll 1$, в угловом распределении $|Y_{\ell\ell}|^2 \propto \sin^{2\ell} \theta$ вероятность найти электрон сконцентрирована в узком интервале углов вблизи $\theta = \pi/2$, что очень похоже на классическую траекторию в форме окружности с радиусом n^2 в плоскости xy . Пример квадрата такой волновой функции приведен на рис. 7.2.

Ценность полуклассической боровской модели не исчерпывается случаем больших n и ℓ . Представление об орбитах и их радиусах (7.22б) позволяет получать

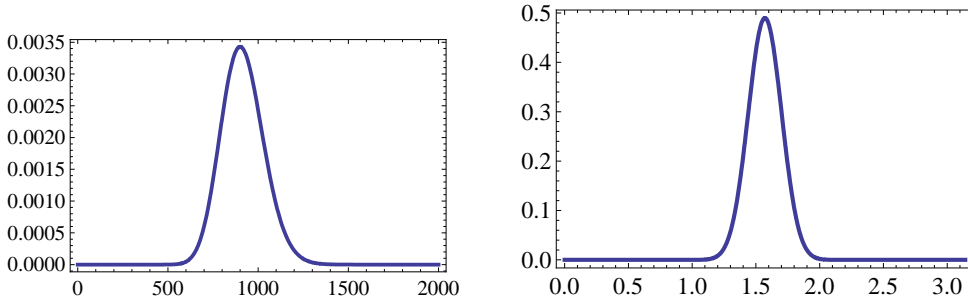


Рис. 7.2. Квадраты радиальной волновой функции $|\chi_{n,\ell=30,29}(r)|^2$ в атомных единицах (слева) и угловой зависимости $|Y_{\ell=m=29}(\theta)|^2$.

правильные оценки и в случаях, когда n и ℓ не очень велики. В этом случае точность оценок не очень высока, но в ряде задач и ее достаточно.

◆ Для состояний с $\ell = n - 2$ имеем $n_r = 1$, при этом решение (7.16) дает $a_0/a_1 = -(\ell + 1)(\ell + 2) \equiv -n(n - 1)$, и в итоге получается выражение из (17.24). Соотношения (17.25) позволяют увидеть те же характерные черты средних, что и в предыдущем случае (а вот численные значения существенно различаются, демонстрируя зависимость рассмотренных величин от ℓ).

◆ *Первый возбужденный уровень $n = 2$.* Радиальные волновые функции приведены выше (см. также рис. 7.1), но вместо использования этих общих выражений удобно заново вычислить необходимые векторы состояний с помощью (17.24) и (6.24):

$$2s : \quad \langle \mathbf{r} | 2, 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} (1 - r/2) e^{-r/2},$$

$$2p : \quad \begin{cases} \langle \mathbf{r} | 2, 1, \pm 1 \rangle = \frac{\mp i}{8\sqrt{\pi}} r e^{-r/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}, \\ \langle \mathbf{r} | 2, 1, 0 \rangle = \frac{i}{\sqrt{32\pi}} r e^{-r/2} \cos \theta. \end{cases} \quad (7.22в)$$

◇ *Спектральные линии.* Энергии фотонов, излученных при переходе из состояния $|n_i \ell_i m_i\rangle$ в состояние $|n_f \ell_f m_f\rangle$, — это $R_y (1/n_f^2 - 1/n_i^2) = \hbar\omega$. Для $n_f = 1$ мы имеем серию Лаймана в ультрафиолетовой области спектра, для $n_f = 2$ — серию Бальмера (четыре линии $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, H_\delta$, соответствующие $n_i = 3, 4, 5, 6$, лежат в видимой области спектра), для $n_f \geq 3$ все линии лежат в инфракрасной области спектра.

◇ Состояния с большими n называют *Ридберговскими*. В этих состояниях «размер» атома $\langle r \rangle$ становится очень большим (ср. (7.22б)), а расстояния между уровнями $E_n - E_{n+1} \approx 2R_y/n^3$ очень малы. Для $n = 40$ расстояние между уровнями атома водорода составляет 0,0004 эВ, что в 60 раз меньше энергии теплового движения при комнатной температуре (0,025 эВ). Поэтому эксперименты с такими атомами возможны только при низких (гелиевых) температурах.

7.3.1. Атом в электрическом поле

Характерные электрические поля в атоме $\mathcal{E}_{at} \sim R_y/ea_B \approx 3 \cdot 10^9$ В/см, а это значительно больше любого поля, которое создают в лаборатории. Поэтому практически всегда воздействие внешнего поля на атом можно считать малым, и при вычислении использовать теорию возмущений. Сдвиг спектральных линий в электрическом поле называют *эффектом Штарка*.

В большинстве физически интересных задач в пределах атомной системы изменение поля ничтожно, т. е. можно считать внешнее поле однородным. Мы направляем ось z вдоль этого поля.

Для атома в электрическом поле возмущение $V = -\mathbf{d}\mathcal{E}$, где \mathbf{d} — электрический дипольный момент атома, $\mathbf{d} = e \sum_a (\mathbf{r}_a - \mathbf{R})$, где \mathbf{R} — координата ядра, ниже мы помещаем его в начало координат. Для атомного состояния $|N\rangle$ поправка первого порядка к энергии есть $-\langle N|\mathbf{d}\mathcal{E}|N\rangle \equiv -\langle N|d_z|N\rangle\mathcal{E}$. Для почти всех атомных систем стационарные состояния одновременно являются собственными состояниями момента импульса, и потому имеют определенную четность. В то же время при отражении координат (замена переменных под интегралом) дипольный момент меняет знак, т. е. меняет знак и величина $\langle N|d_z|N\rangle$, а это значит, что она равна нулю. Это означает, что нет поправки к энергии, линейной по полю. Разумеется, существует поправка (квадратичная по полю) во втором порядке теории возмущений. На классическом языке это соответствует «наведенному» дипольному моменту, возникшему под действием того же поля.

Приведенное рассуждение не работает для атома водорода при $n > 1$, когда имеется дополнительное вырождение по ℓ , т. е. и по четности. Электрическое поле снимает это вырождение, и изменение энергии уровней пропорционально полю.

• Квадратичный эффект Штарка. Поляризуемость

Итак, поправка к энергии основного состояния любого атома дается выражением второго порядка теории возмущений (5.8):

$$\Delta E = E^{(2)} = \sum_{p \neq 0} \frac{|\langle 0|\mathbf{d}\mathcal{E}|p\rangle|^2}{E_0^0 - E_p^0} \equiv -\beta_P a_B^3 \frac{\mathcal{E}_z^2}{2}.$$

Величина $\alpha \equiv \beta_P a_B^3$ называется *поляризуемостью*:

$$\beta_P = \frac{2}{a_B^3} \sum \frac{\langle 0|d_z|p\rangle\langle p|d_z|0\rangle}{E_p^0 - E_0^0} \equiv \frac{2}{a_B^3} \sum \frac{|\langle 0|d_z|p\rangle|^2}{E_p^0 - E_0^0}. \quad (7.23)$$

Все слагаемые этой суммы положительны. Поэтому можно получить для поляризуемости простые оценки без детальных вычислений. Действительно, если заменить все знаменатели на наименьший, т. е. заменить $E_p^0 - E_0^0 \rightarrow E_1^0 - E_0^0$, то правая часть

увеличится, $\beta_P < \frac{2}{a_B^3} \sum_{p \neq 0} \frac{|\langle 0|d_z|p\rangle|^2}{E_1^0 - E_0^0}$. Сумму в числителе можно преобразовать, используя полноту системы состояний $|p\rangle$, к виду

$$\sum_{p \neq 0} |\langle 0|d_z|p\rangle|^2 \equiv \sum_{p \neq 0} \langle 0|d_z|p\rangle\langle p|d_z|0\rangle = \langle 0|d_z^2|0\rangle.$$

Если пренебречь состояниями непрерывного спектра (дающими очень малый вклад в сумму¹), то наименьший возможный знаменатель получается при $E_p = 0$. В итоге получаем оценку

$$2 \frac{\langle 0|d_z^2|0\rangle}{|E_0|} \lesssim \beta_p a_B^3 < 2 \frac{\langle 0|d_z^2|0\rangle}{E_1 - E_0}. \quad (7.24)$$

В частном случае атома водорода $|E_0| = R_y = e^2/(2a_B)$, $E_1 - E_0 = 3R_y/4$ и помощью волновой функции (7.22а) нетрудно вычислить, что $\langle 0|d_z^2|0\rangle = 2e^2 a_B^2$. В итоге наша оценка принимает вид $4 < \beta_p < 16/3$. Точный расчет дает $\beta_p = 4,5$.

• Эффект Штарка для атома водорода с $n=2$.

Возбужденные состояния атома водорода вырождены по ℓ , т. е. и по четности. Под действием электрического поля атом переходит в состояния, которые не являются собственными функциями ℓ . Простейший пример — состояние с $n = 2$. В отсутствие поля 4 вырожденных состояния можно записать в виде базиса состояний с определенной четностью (7.22в). Запишем оператор возмущения в виде матрицы, как это делалось в разд. 5.2.3. Все диагональные матричные элементы возмущения обращаются в ноль. Под действием возмущения $V = e\mathcal{E}z \equiv e\mathcal{E}r \cos\theta$ величина ℓ_z сохраняется. Значит, матричные элементы

$$\langle 2, \ell, 0|V|2, 1, \pm 1\rangle, \langle 2, \ell, \mp 1|V|2, 1, \pm 1\rangle$$

обращаются в ноль. В последние два матричных элемента входят состояния с противоположными четностями и одинаковым значением $m = 0$. Поэтому они отличны от нуля:

$$\langle 2, 1, 0|V|2, 0, 0\rangle = (\langle 2, 0, 0|V|2, 1, 0\rangle)^* = i\Delta, \quad \Delta = 3e\mathcal{E}a_B.$$

В итоге секулярное уравнение принимает вид

$$(E^{(1)})^2 [(E^{(1)})^2 - \Delta^2] = 0.$$

Его решения дают сдвиг уровней в электрическом поле. Два состояния $|2, 1, \pm 1\rangle$ не смешиваются, для них $E_{1,2}^{(1)} = 0$. Два других состояния $|2, \ell, 0\rangle$ смешиваются, и уровни сдвигаются, обеспечивая линейный эффект Штарка: $E_{3,4}^{(1)} = \pm\Delta$. При этом новые состояния имеют вид

$$|\pm\rangle = \frac{|2, 0, 0\rangle \mp |2, 1, 0\rangle}{\sqrt{2}}.$$

7.3.2. Силы Ван-дер-Ваальса

Рассмотрим теперь взаимодействие нейтральных атомов, находящихся на расстоянии R , большом по сравнению с их размерами. Здесь можно пользоваться *адиабатическим приближением*, которое состоит в том, что движения электронов в атомах и самих атомов как целого разделяются, т. е. на электроны каждого из атомов другой атом воздействует как целое, и атомы не обмениваются электронами.

¹Связанное состояние $|0\rangle$ локализовано вблизи $r = 0$, состояния же непрерывного спектра $|\mathbf{k}\rangle$ не локализованы в какой-нибудь области пространства. Поэтому матричные элементы $\langle \mathbf{k}|d_z|0\rangle$ очень малы.

На больших расстояниях R два атома взаимодействуют как диполи $\mathbf{d}_i = e\mathbf{r}_i$ ($i = 1, 2$), и

$$V = \frac{3(\mathbf{d}_1\mathbf{n})(\mathbf{d}_2\mathbf{n}) - \mathbf{d}_1\mathbf{d}_2}{|\mathbf{R}|^3} \equiv \frac{d_{1\alpha}d_{2\beta}}{R^3}N_{\alpha\beta} \equiv R_y v \left(\frac{a_B}{R}\right)^3, \\ (\mathbf{n} = \mathbf{R}/R, \quad N_{\alpha\beta} = 3n_\alpha n_\beta - \delta_{\alpha\beta}).$$

Поправку к энергии основного состояния за счет взаимодействия можно записать в виде

$$U(R) = \sum \frac{\langle 0|V|n_1n_2\rangle\langle n_1n_2|V|0\rangle}{2E_0 - E_{n_1} - E_{n_2}} \equiv -2R_y\eta_V \left(\frac{a_B}{R}\right)^6.$$

В результате углового усреднения с учетом сферической симметрии атомов получается

$$\eta_V = \frac{3}{a_B^6 R_y} \sum_{pq} \frac{|\langle 0|d_{1z}^2|p\rangle|^2 |\langle 0|d_{2z}^2|q\rangle|^2}{E_p + E_q - 2E_0}. \quad (7.25)$$

Вычисление, подобное сделанному выше для поляризуемости, дает

$$\frac{3}{2R_y a_B^6} \frac{\langle 0|d_z^2|0\rangle^2}{E_1 - E_0} > \eta_V \gtrsim \frac{3}{2R_y a_B^6} \frac{\langle 0|d_z^2|0\rangle^2}{|E_0|}.$$

Для взаимодействия двух атомов водорода в основном состоянии это дает $8 > \eta \gtrsim 6$. Аккуратный расчет дает $\eta_V \approx 6,5$.

§ 7.4. Повышенная симметрия некоторых трехмерных систем

Напомним, что собственные состояния кулоновской задачи и изотропного трехмерного осциллятора имеют более высокую степень вырождения, чем дает общая задача о сферически симметричном потенциале. В соответствии с (2.12) это означает, что такие системы обладают более высокой симметрией, чем симметрия группы трехмерных вращений $O(3)$, в них помимо операторов \hat{H} и \hat{L}_i , существуют сохраняющиеся операторы, коммутирующие с гамильтонианом и не коммутирующие со всеми компонентами момента импульса.

В классическом случае эта дополнительная симметрия приводит к тому, что период радиального движения совпадает с периодом движения по углу, и траектория замкнута (эллипс) — в отличие от общего случая, когда эти периоды не совпадают, и траектория не замкнута.

7.4.1. Изотропный осциллятор

Для трехмерного симметричного осциллятора мы построим дополнительные сохраняющиеся операторы в терминах операторов рождения и уничтожения (гл. 4), снабжая их индексами 1, 2, 3 $\equiv x, y, z$. В этих терминах гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + 3/2\right), \quad \hat{N} = \hat{b}_1^+ \hat{b}_1 + \hat{b}_2^+ \hat{b}_2 + \hat{b}_3^+ \hat{b}_3. \quad (7.26)$$

Удобно обозначить собственное состояние осциллятора в базисе собственных функций осцилляторов по отдельным осям через $|n_1, n_2, n_3\rangle \equiv |n_1\rangle|n_2\rangle|n_3\rangle$.

▽ Энергия состояния $E = \hbar\omega(n + 3/2)$, где $n = n_1 + n_2 + n_3$, при заданном n состояния вырождены по различным значениям n_i . Простой подсчет показывает, что кратность этого вырождения составляет $K = (n + 1)(n + 2)/2$.

▽ В состояниях с данным значением n представлены все значения момента $\ell = n, n - 2, n - 4, \dots$. Чтобы убедиться в этом, достаточно просуммировать кратности вырождений перечисленных значений ℓ и сравнить с величиной K .

▽ Наконец, при четном n состояния четны, при нечетном n — нечетны. Действительно, при четном n либо все числа n_i — четные, тогда при отражении координат все волновые векторы не меняют знак. Другая возможность — например n_2 четно, а n_1 и n_3 нечетны. Тогда при отражении $|n_2\rangle$ не меняет знак, а каждый из векторов $|n_1\rangle$ и $|n_3\rangle$ так, что их произведение $|n_1, n_2, n_3\rangle$ сохраняется.

Точно так же, при нечетном n либо все числа n_i — нечетные, либо одно из них нечетно, а два — четные. В обоих случаях произведение собственных векторов $|n_1\rangle|n_2\rangle|n_3\rangle$ при отражении меняет знак, т. е. нечетно.

▼ Операторы дополнительных сохраняющихся величин можно выбрать в виде

$$\hat{A}_j^i = \hat{b}_j^+ \hat{b}_i - \delta_{ij} \hat{N} / 3. \quad (7.27)$$

Отметим, что этих операторов по виду 9, но независимых среди них только 8, т. к. след составленной из этих операторов матрицы равен нулю. Компоненты вектора момента импульса отвечают только трем из этих операторов, $\hat{\ell}_3 = -i(\hat{A}_2^1 - \hat{A}_1^2)$, $\hat{\ell}_1 = -i(\hat{A}_3^2 - \hat{A}_2^3)$, $\hat{\ell}_2 = -i(\hat{A}_1^3 - \hat{A}_3^1)$ — ср. (4.24). Существование еще пяти некоммутирующих друг с другом и с $\hat{\ell}_i$ сохраняющихся операторов и приводит (на алгебраическом языке) к появлению дополнительного вырождения в задаче о трехмерном осцилляторе.

Коммутативность, например, оператора \hat{A}_3^2 с гамильтонианом видна из того, что его действие на собственное состояние $|n_1, n_2, n_3\rangle$ превращает его в состояние $|n_1, n_2 + 1, n_3 - 1\rangle$ с той же энергией.

▽ Перестановочные соотношения операторов \hat{A}_j^i друг с другом легко устанавливаются, это

$$[\hat{A}_j^i, \hat{A}_\ell^k] = \delta_{i\ell} \hat{A}_j^k - \delta_{kj} \hat{A}_\ell^i. \quad (7.28)$$

Эти перестановочные соотношения совпадают с перестановочными соотношениями *генераторов* группы унитарных матриц 3 порядка с равным нулю следом, которую называют группой $SU(3)$. Эта симметрия — более высокая, чем симметрия группы трехмерных вращений $O(3)$ или изоморфная ей группа унитарных матриц 2 порядка с равным нулю следом $SU(2) \in SU(3)$. Это и есть более высокая симметрия рассматриваемой задачи.

7.4.2. Кулоновская задача. Метод Фока

Для кулоновской задачи три дополнительных сохраняющихся оператора — три компоненты квантового аналога вектора Рунге-Ленца-Лапласа (сохраняющегося в

классической механике)¹

$$\mathbf{A} = -e^2 \frac{\mathbf{r}}{r} + \frac{[\mathbf{p} \times \mathbf{L}] - [\mathbf{L} \times \mathbf{p}]}{2m}. \quad (7.29)$$

Прямым вычислением нетрудно убедиться, что наряду с обычными перестановочными соотношениями $[\hat{\ell}_i, \hat{H}] = 0$, $[\hat{\ell}_i, \hat{\ell}_j] = ie_{ijk}\ell_k$ (7.2) и $[\hat{\ell}_i, \hat{A}_j] = ie_{ijk}A_k$ (6.3) выполняются также специфические соотношения (напомним связь $\mathbf{L} = \hbar\boldsymbol{\ell}$)

$$[\hat{A}_i, \hat{H}] = 0, \quad [\hat{A}_i, \hat{A}_j] = -2i\hbar\hat{H}e_{ijk}\hat{L}_k/m. \quad (7.30)$$

Рассмотрим теперь набор состояний дискретного спектра с фиксированной (отрицательной) энергией $-\varepsilon$. Для этих состояний в перечисленные перестановочные соотношения мы подставим $\hat{H} \rightarrow -\varepsilon$ и изменим нормировку оператора $\hat{\mathbf{A}}$, обозначив $\hat{\mathbf{G}} = -\hat{\mathbf{A}}\sqrt{(m/2\varepsilon)}/\hbar$. Полный набор остающихся перестановочных соотношений имеет вид:

$$\begin{aligned} [\hat{\ell}_i, \hat{\ell}_j] &= ie_{ijk}\ell_k, & [\hat{\ell}_i, \hat{G}_j] &= ie_{ijk}G_k, \\ [\hat{G}_i, \hat{G}_j] &= ie_{ijk}\ell_k. \end{aligned} \quad (7.31)$$

Эти соотношения обнаруживают симметрию между векторами $\hat{\boldsymbol{\ell}}$ и $\hat{\mathbf{G}}$. Они в точности совпадают с перестановочными соотношениями компонент четырехмерного эвклидова тензора момента импульса, в котором компоненты вектора $\hat{\boldsymbol{\ell}}$ отвечают обычным трехмерным вращениям, а компоненты вектора $\hat{\mathbf{G}}$ отвечают вращениям в плоскостях (x_i, x_4) (приложение 17.2.6). Это означает, что кулоновская задача обладает группой симметрии четырехмерных вращений $O(4)$, которая включает в себя группу трехмерных вращений $O(3)$ как подгруппу (В.А. Фок, 1935 г.).

◆ Перейдем к вычислению спектра энергий кулоновской задачи. Заметим сначала, что имеют место два легко проверяемых тождества,

$$(\boldsymbol{\ell} \mathbf{G}) = (\mathbf{G} \boldsymbol{\ell}) = 0, \quad \ell^2 + \mathbf{G}^2 + 1 = \frac{R_y}{\varepsilon}. \quad (7.32)$$

Введем теперь два новых векторных оператора

$$v_i^{(\pm)} = \frac{1}{2} (\ell_i \pm G_i). \quad (7.33)$$

Легко проверить, что перестановочные соотношения между компонентами каждого из них точно такие же, как и для компонент оператора момента импульса, а друг с другом они коммутируют,

$$[v_i^{(\pm)}, v_j^{(\pm)}] = ie_{ijk}v_k^{(\pm)}, \quad [v_i^{(\pm)}, v_j^{(\mp)}] = 0. \quad (7.34)$$

Нетрудно получить отсюда, что $[(\hat{v}^{(+)})^2, (\hat{v}^{(-)})^2] = 0$. Это значит, что операторы $(\hat{v}^{(+)})^2$ и $(\hat{v}^{(-)})^2$ одновременно измеримы. В силу (7.34) собственные значения этих

¹Сравнивая с классическим вектором того же наименования, читатель обнаружит здесь симметризацию в соответствии с рецептом, обсуждавшимся перед (1.5).

операторов вычисляются точно так же, как и собственные значения оператора квадрата момента импульса в § 6.1, это $v^{(\pm)}(v^{(\pm)} + 1)$, причем в отсутствие прямой связи введенных операторов с углами вращения, целыми должны быть только значения $2v^{(\pm)}$, а не $v^{(\pm)}$ (6.12). Поскольку $(\ell \mathbf{G}) = (\mathbf{G} \ell) = 0$, то $(\hat{\mathbf{v}}^{(+)})^2 = (\hat{\mathbf{v}}^{(-)})^2 = (\ell^2 + \mathbf{G}^2)/4$. Это означает, что собственные значения операторов $\mathbf{v}_{(+)}^2$ и $\mathbf{v}_{(-)}^2$ совпадают, т. е. $v^{(+)} = v^{(-)}$. удобно обозначить $v^{(+)} = v^{(-)} = v$. Подставляя эти собственные значения во второе равенство (7.32), получим результат, совпадающий с (7.19) с точностью до обозначений:

$$4v(v+1) + 1 = \frac{R_y}{\varepsilon} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \varepsilon = \frac{R_y}{(2v+1)^2} \equiv \frac{R_y}{n^2}, \quad \text{где } n = 2v + 1. \quad (7.35)$$

Убедимся теперь, что в этом подходе получаются и другие известные свойства атома водорода.

▽ При заданном значении v **кратность вырождения** каждого из операторов $(\hat{\mathbf{v}}^{(+)})^2$ и $(\hat{\mathbf{v}}^{(-)})^2$ (число различных проекций операторов $\hat{v}_z^{(+)}$ и $\hat{v}_z^{(-)}$ на ось z) составляет $2v + 1$. Поэтому полная кратность вырождения уровня составляет $(2v + 1)(2v + 1) = n^2$.

▽ **Возможные значения полного момента.** Напомним, что $\hat{\ell} = \hat{\mathbf{v}}^{(+)} + \hat{\mathbf{v}}^{(-)}$ при заданных $v^{(+)} = v^{(-)} = v$. Это соотношение может реализовываться при различных относительных ориентациях векторов $\mathbf{v}^{(+)}$ и $\mathbf{v}^{(-)}$. В итоге орбитальный момент ℓ пробегает все целочисленные значения от 0 до $2v = n - 1$ (см. подробное обсуждение сходного вопроса в § 11.1).

▽ **Четность.** Отметим, что оператор $\hat{\mathbf{G}}$ не коммутирует с оператором пространственного отражения, поэтому общие собственные состояния гамильтониана и любого из операторов \hat{G}_i не имеют определенной четности.

§ 7.5. Задачи

• Осциллятор

1. Для прямоугольной сферически симметричной потенциальной ямы докажите условие (7.5), рассмотрите также предельный переход $U \rightarrow \infty$, $a \rightarrow 0$. При каком условии в пределе остается связанное состояние?
2. Могут ли быть в центрально-симметричном поле уровни с кратностью вырождения 2, 7, 9? Какому вырождению по ℓ они могут соответствовать?
3. Определить уровни энергии $E_{n\ell}$ электрона с моментом ℓ , заключенного в непроницаемую сферу радиуса R , используя квазиклассическое правило квантования. Сравнить с точным решением при больших R и $n \gg \ell$.
4. Для изотропного плоского осциллятора $U = m\omega^2(x^2 + y^2)/2$ найти уровни энергии и кратность их вырождения.
5. Для изотропного сферического осциллятора $U = m\omega^2 r^2/2$
 - а) в квазиклассическом приближении найти уровни энергии, найти минимальное значение энергии при заданном ℓ ;

- б) найдите уровни с $n_r = 0, \ell = 0, 1$ и $n_r = 1, \ell = 0$, пользуясь вариационным методом с пробными функциями вида $P(r)e^{-r/a}$, где $P(r)$ — простейшие полиномы, сравнить результаты с точным решением;
- в) найти поправки к трем нижним уровням энергии под действием возмущения $V = \gamma x^2 y^2$.
- в) найти поправки к трем нижним уровням энергии под действием возмущений $V_a = 2\gamma xy$ и $V_b = \gamma(x^2 - y^2)$.

• **Атом водорода и пр.**

6. Оценить размеры и уровни энергии водородоподобных атомов $He^+, Li^{++}, Pb^{82+}, e^+e^-, \mu^-p, \mu^-p\pi^+, \mu^-Pb^{82+}$ (Pb^{82+} — ядро свинца).
7. Для атома водорода в основном состоянии ($1s$) построить графики dW/d^3r и dW/dr в зависимости от r . Найти $\phi_{100}(p)$ и построить графики dW/d^3p и dW/dp . Найти $\langle \mathbf{p} \rangle, \langle p \rangle$ и $\Delta p, \langle r \rangle$ и Δr . Оценить напряженность электрического поля на расстоянии $r = a_B$ от ядра.
8. Для состояний $2s$ и $2p$ атома водорода построить графики dW/d^3r в зависимости от r и θ . Найти среднее магнитное поле, создаваемое электроном в центре в состоянии $2p$.
9. Найти средние значения кинетической и потенциальной энергии для различных состояний атома водорода.
10. Найти уровни энергии в системе с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} - \frac{e^2}{r} \left(1 - \frac{a_M}{\gamma r} \right) \quad \left(a_M = \frac{Me^4}{\hbar^2} \right).$$

Проанализировать два предельных случая.

- а) В **водородоподобном атоме** $M = m_e$, отклонение от кулоновского потенциала моделирует эффект поляризуемости атомного остатка под действием валентного электрона, $\gamma \gg 1$. Рассматривая эту поправку как возмущение, сравнить точное решение с решением, использующим дифференцирование энергии по параметру (5.11).
- б) В **двухатомной молекуле** M — приведенная масса пары ядер, отклонение от кулоновского потенциала описывает отталкивание электронов разных ядер, при этом $\gamma \ll 1$ — см. обсуждение на стр. 215.
11. Найти поправки к энергии атома водорода, обусловленные конечными размерами ядра.
12. При каких значениях коэффициентов A и B в векторе состояния атома водорода $|N\rangle = A|2, 1, 0\rangle + B|2, 0, 0\rangle$ среднее значение дипольного момента $\langle N | e\mathbf{r} | N \rangle = \langle \mathbf{d} \rangle$ максимально? Найти величину $\langle d \rangle$ при этом.
13. Улучшить оценки (7.24), (7.25) для атома водорода в основном состоянии, включив в ответы точно вклады первых возбужденных состояний.
14. Найти поправки к уровням энергии с $n = 1, 2$ для потенциалов $U = -ge^{-\mu r}/r$ (*Юкава*) и $U = -ge^{-(\mu r)^2}/r$, рассматривая отклонение поля от кулоновского как возмущение. Рассмотреть случаи $\mu a_B \ll 1$ и $\mu a_B \gg 1$. Решить ту же задачу

для $n = 1$ вариационным методом, используя водородоподобные и осцилляторные пробные волновые функции. Сравнить результаты.

Глава 8

ПЕРИОДИЧЕСКОЕ ПОЛЕ

§ 8.1. Основные понятия

Значительную часть вопросов физики твердого тела можно понять, рассматривая линейные периодические цепочки (одномерный кристалл) и движение частиц в них. Этим мы и займемся ниже. Особенности трехмерного случая мы рассмотрим лишь качественно.

Мы рассматриваем линейную цепочку с периодом (*постоянной решетки*) a , содержащую N повторяющихся элементов — *элементарных ячеек*, в пределе $N \rightarrow \infty$. Этот предельный переход не тривиален. Состояния частиц в решетке конечных размеров — стоячие волны (и волны, затухающие при отходе от границ). Различные возможные условия на границах определяют разные фазовые соотношения, возможные в этих волнах. В то же время число ячеек в наблюдаемых решетках обычно чудовищно велико, и естественно надеяться, что физические результаты не зависят от деталей граничных условий. Поэтому обычно рассматривают удобный частный случай периодических граничных условий, что соответствует кольцу из N ячеек. При таком подходе переход $N \rightarrow \infty$ не встречает трудностей.

Обозначим через $x_n \equiv na$ координату n -й ячейки.

Наша *бесконечная* решетка не меняется при сдвиге на величину постоянной решетки a — *инвариантна по отношению к таким сдвигам*. Поэтому можно выбрать стационарные состояния системы, которые являются собственными функциями оператора конечного сдвига $T_a = \exp(ia\hat{p}/\hbar)$ (1.24):

$$\hat{T}_a\psi(x) \equiv \psi(x+a) = \lambda_T\psi(x). \quad (8.1)$$

Какие же значения может принимать величина λ_T ?

Если $|\lambda_T| \neq 1$, то вероятности пребывания в соседних ячейках решетки различны, а это противоречит инвариантности относительно сдвигов. (Например, для $|\lambda_T| < 1$ амплитуда в точке $x - Ka$ с ростом K неограниченно возрастает!) Поэтому должно быть $|\lambda_T| = 1$, и можно записать, определяя новую величину q ,

$$\lambda_T = e^{iqa}. \quad (8.2)$$

Величину $\hbar q$ (а часто и величину q) называют *квазиимпульсом*.

По определению, изменение q на величину, кратную $2\pi/a$, не меняет фактора периодичности λ_T . Поэтому физически осмысленный интервал изменения квазиимпульса имеет длину $2\pi\hbar/a$. Принято определять квазиимпульс в интервале,

$$q \in (-\pi/a, \pi/a). \quad (8.3)$$

В (кольцевой) цепочке из N ячеек для волновой функции выполняется условие периодичности:

$$\psi(x_n + Na) = \psi(x_n). \quad (8.4a)$$

Подстановка сюда (8.1) показывает, что в этом случае реализуются только такие значения квазиимпульса, для которых

$$\lambda_T^N \equiv e^{iqNa} = 1 \Rightarrow q = 2\pi r/(Na), \quad r — \text{целое} \in (-N/2, N/2). \quad (8.4b)$$

Таким образом, **число различных значений квазиимпульса (в дальнейшем — число уровней в зоне) совпадает с числом элементарных ячеек кристалла N**. Поскольку это число обычно очень велико¹, говорят о непрерывном изменении q в интервале (8.3).

При соударениях «частиц» квазиимпульс сохраняется почти так же, как и обычный импульс при столкновении обычных частиц. Есть, однако, и одно важное отличие. Если полученная сумма $\hbar q_1 + \hbar q_2$ превосходит величину $\pi\hbar/a$, то за сумму принимается величина $\hbar q_1 + \hbar q_2 - 2\pi\hbar/a$. Аналогично, если полученная сумма $\hbar q_1 + \hbar q_2$ меньше величины $-\pi\hbar/a$, то за сумму принимается величина $\hbar q_1 + \hbar q_2 + 2\pi\hbar/a$. Такие сложения импульсов называют сложением *с перебросом*.

§ 8.2. Движение в периодическом поле

8.2.1. Общее рассмотрение

Изучим движение электрона в «замороженной» кристаллической решетке, т. е. в периодическом поле

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x); \quad U(x+a) = U(x). \quad (8.5)$$

В этом случае при $x \rightarrow \pm\infty$ взаимодействие не исчезает, и нет оснований выбирать начало отсчета потенциала так, чтобы в этом пределе потенциал $U \rightarrow 0$.

Гамильтониан коммутирует с оператором сдвига \hat{T}_a (1.24). В таком поле существуют стационарные состояния, являющиеся собственными функциями оператора сдвига, — состояния с определенным квазиимпульсом q .

• Перепишем общую собственную функцию операторов конечного сдвига и энергии в виде $\psi = e^{iqx} u_q(x)$. Из (8.1), (8.2) следует, что *блоховская амплитуда* $u_q(x)$

¹Такой подход позволяет увидеть и важные свойства кольцевых молекул с не очень большим числом одинаковых элементов N , таких, например, как молекула бензола ($N=6$).

— периодическая функция:

$$\psi = e^{iqx} u_q(x); \quad u_q(x+a) = u_q(x), \quad \left(\int_0^a |u_q(x)|^2 dx = 1 \right). \quad (8.6)$$

(Здесь выписана также обычная нормировка блоховских амплитуд — на ячейке.) Для определения блоховской амплитуды достаточно использовать решение одномерного уравнения Шредингера на одной ячейке. Соответствующие уравнения имеют вид:

$$\hat{H} e^{iqx} u_q(x) = E(q) e^{iqx} u_q(x); \quad \hat{T}_a \psi_{E(q)} = e^{iqa} \psi_{E(q)}. \quad (8.7)$$

Набор функций Блоха $e^{iqx} u_q(x)$ полон. По этим функциям можно разложить произвольную волновую функцию электрона в кристалле:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q b_q e^{iqx} u_q(x). \quad (8.8)$$

При вторичном квантовании (§ 12.2) коэффициент b_q приобретает смысл оператора уничтожения электрона с квазиимпульсом q или рождения дырки с квазиимпульсом $-q$.

• Запишем уравнение, комплексно сопряженное к уравнению Шредингера (8.7) и уравнение Шредингера для состояния, которое получается из исходного заменой $q \rightarrow -q$:

$$\begin{aligned} \hat{H}^+ e^{-iqx} u_q^*(x) &= E(q) e^{-iqx} u_q^*(x), \\ \hat{H} e^{-iqx} u_{-q}(x) &= E(-q) e^{-iqx} u_{-q}(x). \end{aligned}$$

Поскольку \hat{H} — эрмитов оператор (т. е. $\hat{H}^+ = \hat{H}$), каждое из этих уравнений определяет собственные функции одних и тех же операторов — гамильтониана и конечного сдвига. Поэтому эти функции совпадают, и, стало быть, выполняется *теорема Крамерса*:

$$E(-q) = E(q), \quad u_{-q}(x) = u_q^*(x). \quad (8.9)$$

Таким образом, собственные состояния гамильтониана двукратно вырождены (так же, как при свободном движении.)

Энергетические зоны. Обсудим сначала построение решения уравнения Шредингера в случае произвольного периодического потенциала. Для этого мы рассмотрим решения в двух соседних ячейках и «сошьем» их на границе.

«Первая» ячейка, $0 < x < a$. При заданной энергии E уравнение Шредингера имеет два линейно независимых решения, обозначим их $\phi_1(x, E)$ и $\phi_2(x, E)$ (граничные условия пока не фиксируются!). Общее решение имеет вид

$$\psi(x, E)|_{0 < x < a} = A\phi_1(x, E) + B\phi_2(x, E). \quad (8.10)$$

Без ограничения общности мы выбираем линейно независимые решения одномерного уравнения Шредингера ϕ_1 и ϕ_2 действительными (как решения $\sin kx$ и $\cos kx$ для свободного движения). Комплексным окажется отношение B/A .

«Вторая» ячейка, $a < x < 2a$. Решение, обладающее свойством периодичности (8.1), можно записать в виде

$$\psi(x, E)|_{a < x < 2a} = \lambda_T [A\phi_1(x - a, E) + B\phi_2(x - a, E)].$$

Условия непрерывности волновой функции и ее производной на границе ячеек ($x = a$) записываются в виде системы уравнений для A и B (далее мы опускаем аргумент E)

$$\begin{aligned} A\phi_1(a) + B\phi_2(a) &= \lambda_T (A\phi_1(0) + B\phi_2(0)), \\ A\phi_1'(a) + B\phi_2'(a) &= \lambda_T (A\phi_1'(0) + B\phi_2'(0)). \end{aligned}$$

Эта система имеет ненулевые решения, только если обращается в ноль ее детерминант. Это условие удобно записать в виде уравнения, связывающего энергию E и параметр периодичности λ_T :

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_T + \lambda_T^{-1}}{2} &= \Lambda(E), \\ \Lambda(E) &= \frac{\phi_1(0)\phi_2'(a) + \phi_1(a)\phi_2'(0) - \phi_2(0)\phi_1'(a) - \phi_2(a)\phi_1'(0)}{2W}, \\ W &= \phi_1\phi_2' - \phi_2\phi_1'. \end{aligned} \quad (8.11)$$

(Стоящий в знаменателе вронскиан W (2.14) от координат не зависит.)

Независимые решения одномерного уравнения Шредингера для отдельной ячейки ϕ_i можно выбрать действительными. Поэтому величина $\Lambda(E)$ действительна.

Если $|\Lambda(E)| \leq 1$, реализуется случай «истинной периодичности», параметр периодичности λ_T может быть выражен через квазиимпульс (8.2) так, что уравнение (8.11) приобретает вид $\Lambda = \cos(qa)$. Ясно, что небольшому изменению E отвечает и небольшое изменение $\Lambda(E)$. Поэтому значения E , для которых выполняется условие $|\Lambda(E)| \leq 1$, образуют непрерывные области. Их называют *разрешенными энергетическими зонами*.

Если же $|\Lambda(E)| \geq 1$, то условие «истинной периодичности» (8.2) не выполняется, действительных значений квазиимпульса, отвечающих данному значению E , не существует. Эти значения энергии образуют *запрещенные зоны* энергии.

• Вычислим теперь вектор плотности тока вероятности. Подставляя в (2.5) волновую функцию (8.10), с учетом действительности ϕ_i найдем, используя обозначения (8.11)

$$j = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^*(d\psi/dx) - (d\psi^*/dx)\psi] = \frac{\hbar \cdot \text{Im}(AB^*)}{m} W. \quad (8.12)$$

Поскольку вронскиан W не зависит от координат, плотность тока постоянна. Более подробные вычисления позволяют увидеть, что знак плотности тока совпадает со знаком квазиимпульса (точнее, со знаком величины $\sin qa$). Таким образом, собственные состояния оператора конечного сдвига представляют собой плоские волны, распространяющиеся направо ($q > 0$) или налево ($q < 0$). Волновое число этих волн задается квазиимпульсом q , границы изменения которого конечны — в отличие от обычного импульса. При переходе к пределу $a \rightarrow 0$ мы возвращаемся к системе

обычных плоских волн — собственных функций оператора импульса¹.

• Решая уравнение (8.11) с $\lambda_T = e^{iqa}$, мы находим энергию состояния E при заданном значении квазиимпульса q , т. е. зависимость энергии от квазиимпульса (закон дисперсии). Обычно значение $q = 0$ соответствует верхнему или нижнему краю зоны. Поскольку $E(q) = E(-q)$ (8.9), то при $qa \ll 1$ можно записать

$$E(q) = E_0 + \hbar^2 q^2 / 2m^*. \quad (8.13)$$

Здесь m^* — коэффициент, который по естественной аналогии называют *эффективной массой*. Если $m^* < 0$, говорят об отрицательных массах — *дырках*. В разных кристаллах реализуются случаи с эффективной массой, принимающей значения от $\pm 0,05m_e$ до $\pm 100m_e$, но чаще m^* не сильно отличается от массы свободного электрона m_e .

∇ В грубых оценках полагают, что закон дисперсии (8.13) справедлив во всей зоне, тогда эффективная масса и характерное время движения между ячейками t_k по порядку величины составляют

$$|m_k^*| \sim \frac{\hbar^2 / a^2}{\Delta E_k}, \quad t_k \sim \frac{\hbar}{\Delta E_k}. \quad (8.14)$$

• Поучительно пронаблюдать процесс возникновения этих зон при компьютерном моделировании системы уровней и энергетической зависимости коэффициента прохождения в наборе повторяющихся одинаковых ям с ростом числа этих ям (приложение А, задание 2). Многие детали можно увидеть при компьютерном моделировании бесконечной цепочки повторяющихся ям или горбов (приложение А, задание 3). Изучение зонной структуры, закона дисперсии, изменения волновой функции и ее фазы в зависимости от квазиимпульса и для разных форм элементарной ячейки дает очень полезный опыт.

8.2.2. Периодическое поле из δ -ям или барьеров

Приведенная общая схема доводится до конца при описании движения частицы в поле «забора» из δ -ям:

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} - G \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + na). \quad (8.15)$$

(Сингулярность потенциала меняет форму условий сшивки.)

Найдем те решения уравнения Шредингера, которые являются и собственными функциями оператора конечного сдвига \hat{T}_a . Обозначим

¹Естественно ожидать, что ответ можно получить предельным переходом от системы с конечным числом одинаковых ям. Однако в такой системе собственные значения гамильтониана отвечают стоячим, а не бегущим волнам. Кажущееся противоречие разрешается, если вспомнить, что при увеличении числа ячеек стационарные состояния сближаются, и при $N \rightarrow \infty$ ближайšie четные и нечетные уровни имеют одинаковые энергии (вырождены) так, что из них уже можно формировать решения, отвечающие собственным функциям оператора конечного сдвига — бегущим волнам (подобно тому, как при свободном движении существуют эквивалентные базисы стоячих и бегущих волн).

$$k_0 = 2mG/\hbar^2, \quad \varkappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \text{ при } E < 0, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ при } E > 0.$$

При $E < 0$ в области $0 < x < a$ решения — линейные комбинации соответствующих решений для «свободного» движения с отрицательной энергией $e^{\varkappa x}$ и $e^{-\varkappa x}$. Последующие вычисления упрощаются при выборе этих комбинаций в виде $\phi_1(x) = \text{sh}\varkappa(a-x)$, $\phi_2(x) = \text{sh}\varkappa x$ так, что

$$\psi_q(x) = A \text{sh}\varkappa(a-x) + B \text{sh}\varkappa x. \quad (8.16)$$

В соответствии с (8.7) запишем это решение для области $a < x < 2a$ в виде $\psi_q(x) = e^{iqa} \psi_q(x-a)$ (отсчет от левой ямы). Из непрерывности волновой функции в точке a получается, что $B = A e^{iqa}$. Далее, из условия сшивки в форме (2.17) точно так же, как и в общем случае несингулярных потенциалов (8.11), получается уравнение, определяющее зависимость энергии $E = (\hbar\varkappa)^2/(2m)$ от квазиимпульса $\hbar q$ (вторая строчка получена повторением предыдущего рассмотрения для $E = (\hbar k)^2/(2m) > 0$):

$$\cos qa = \begin{cases} ch\varkappa a - \frac{k_0}{2\varkappa} \text{sh}\varkappa a & \text{при } E < 0, \quad (a) \\ \cos ka - \frac{k_0}{2k} \sin ka & \text{при } E > 0 \quad (b) \end{cases} \left(k_0 = \frac{2mG}{\hbar^2} \right). \quad (8.17)$$

Эти уравнения имеют действительные решения, только если правая часть по модулю не превосходит 1.

Для дальнейшего обсуждения удобно обозначить $g = k_0 a/2$, $\varkappa a = X$, $ka = Y$ и ввести величину E_g — энергию уровня уединенной «родительской» ямы (2.23), получающуюся из условия $\varkappa = k_0/2$. При этом правые части уравнений (8.17(a)), (8.17(b)) принимают вид $chX - (g/X) \text{sh}g$ и $\cos Y - (g/Y) \sin g$ соответственно.

◇ Рассмотрим сначала нижнюю разрешенную зону.

При $\varkappa = k_0/2$ ($X = g$) уравнение (8.17(a)) для определения квазиимпульса принимает вид $\cos qa = e^{-g}$. Это уравнение всегда имеет решение. Таким образом, нижняя разрешенная зона окружает уровень энергии уединенной «родительской» ямы E_g . Однако, эта энергия отвечает $q \neq 0$, т. е. не отвечает дну ямы. При больших значениях параметра g оказывается, что $qa \approx \pi/2$, т. е. энергия «родительской» ямы близка к середине зоны.

Для определения нижней границы разрешенной зоны достаточно взять $q = 0$ в уравнении (8.17(a)). При этом оно превращается в уравнение $\text{th}(X/2) = g/X$. При $g \ll 1$ отсюда получается $X_n = \sqrt{2g} \Rightarrow \varkappa_n = \sqrt{k_0/a}$, а при $g \gg 1$ имеем $X_n = g(1 + 2e^{-g}) \Rightarrow \varkappa_n \approx (k_0/2)(1 + 2e^{-g})$.

Уравнение для верхней границы разрешенной зоны в области отрицательных энергий получается из этого уравнения при $qa = \pi$ и имеет вид $\text{th}(X/2) = X/g$. Это уравнение имеет (единственное) решение только при $g > 2$ ($k_0 a > 4$) (сравните наклоны кривой $\text{th}X$ и прямой X/g вблизи начала координат). При $g \gg 1$ отсюда получается $X_b = g(1 - 2e^{-g}) \Rightarrow \varkappa_b \approx (k_0/2)(1 - 2e^{-g})$. При $g \ll 1$ разрешенная зона заходит в область положительных энергий, и ее граница определяется из уравнения (8.17(b)) при $qa = \pi$, это $ka = \pi$. Таким образом, в области отрицательных

энергий имеется только одна разрешенная зона, может быть, выходящая в область положительных энергий (это — частное свойство нашей модели).

С ростом величины k_0a ширина нижней разрешенной зоны уменьшается. При больших значениях k_0a разрешенная зона сосредоточится вокруг значения энергии, отвечающего уединенной яме $\varkappa = k_0/2 -$ (2.23), а ширина этой зоны оказывается порядка этой энергии, умноженной на коэффициент туннелирования $D \sim e^{-g}$.

Рассмотрим теперь малые отклонения энергии от значения (2.23), $E = E_g + \varepsilon$.

При этом $X = g \left(1 + \frac{\varepsilon}{2E_g}\right) \equiv g + \delta$. Подставим это разложение в правую часть (8.17(a)). Удерживая только члены первого порядка малости по δ , найдем

$$\cos qa = e^{-g} + \delta(e^{-g} + shg/g).$$

При малых значениях q из этого уравнения легко получается значение эффективной массы электрона при любом значении g . При $g \gg 1$, когда зона очень узкая, это уравнение упрощается. В скобках можно отбросить e^{-g} по сравнению с shg/g и записать $shg \approx e^g/2$. В итоге получается закон дисперсии (зависимость энергии от квазиимпульса) в нижней разрешенной зоне при $g \gg 1$, а из него и эффективная масса электрона в этой зоне:

$$\varepsilon = 4E_g e^{-g} (\cos qa - e^{-g}) \Rightarrow m^* = \frac{\hbar^2}{4E_g a^2} e^g = 2me^g/g^2. \quad (8.18)$$

Подчеркнем, что полученное простое выражение для закона дисперсии работает только для узкой разрешенной зоны. Можно надеяться, что этот вывод сработает для нижней узкой разрешенной зоны и для потенциала, не имеющего δ -видную форму. Для других зон даже в нашем случае закон дисперсии оказывается более сложным.

◇ Обсудим теперь подробно, что происходит в области положительных энергий, когда наше основное уравнение (8.17(b)) принимает вид

$$\cos qa = \cos Y - (g/Y) \sin Y, \quad g = k_0a/2, \quad Y = ka. \quad (8.19)$$

Границы зон. Границам зон отвечают значения $\cos qa = \pm 1$. Для $\cos qa = 1$ и -1 без труда получаются решения $Y_n = \pi n$ и, кроме того, наше уравнение преобразуется к паре уравнений

$$\begin{aligned} \operatorname{tg}(Y_k^{d1}/2) + \frac{g}{Y_k^{d1}} &= 0 & (\cos qa = 1), \\ \operatorname{tg}(Y_k^{d2}/2) - \frac{Y_k^{d2}}{g} &= 0 & (\cos qa = -1). \end{aligned} \quad (8.20)$$

В величинах Y_k^{d1} и Y_k^{d2} верхний индекс нумерует тип решения, а нижний — его номер в порядке возрастания, начиная с наименьшего значения $k = 1$. Отметим, что на решениях Y_k^{d1} и Y^n с четным n мы имеем $qa = 0$, а на решениях Y_k^{d2} и Y^n с нечетным n мы имеем $qa = \pm\pi$.

Графическое решение этих уравнений показывает, что последовательность решений, а стало быть разрешенных (Р) и запрещенных (З) зон при возрастании энергии

от нуля (напомним, что $Y = a\sqrt{2mE/\hbar^2}$) выглядит следующим образом:

$$Y = \begin{array}{cccccccc} Y_n & \leftrightarrow & Y_1^{d1} & \leftrightarrow & \pi & \leftrightarrow & Y_1^{d2} & \leftrightarrow & 2\pi & \leftrightarrow & Y_2^{d1} & \leftrightarrow & 3\pi & \leftrightarrow & Y_2^{d2} & \dots \\ \mathfrak{Z}_1 & & & & \mathfrak{P}_2 & & & & \mathfrak{P}_3 & & & & \mathfrak{P}_4 & & & \mathfrak{Z}_4 & \dots \end{array} \quad (8.21a)$$

(Значок снизу указывает номер запрещенной или разрешенной зоны, первая разрешенная зона расположена при $E < 0$, для $k_0a < 4$ нижняя граница первой запрещенной зоны Y_n расположена при отрицательных энергиях, а при $k_0a > 4$ определяется наименьшей величиной Y^{d2}). Иными словами, при положительных энергиях разрешенные зоны располагаются в следующих границах по величине $Y = ka$:

$$\begin{aligned} \mathfrak{P}_2 : & \left(Y_1^{d1}, \pi \right), & \mathfrak{P}_3 : & \left(Y_1^{d2}, 2\pi \right), \\ \mathfrak{P}_4 : & \left(Y_2^{d1}, 3\pi \right), & \mathfrak{P}_5 : & \left(Y_1^{d2}, 4\pi \right), \dots \end{aligned} \quad (8.21б)$$

В рамку заключены те значения Y , для которых $q = 0$.

Таким образом, зоны, для которых квазиимпульс обращается в нуль на дне зоны (эффективная масса положительна) чередуются с зонами, для которых квазиимпульс обращается в нуль на «потолке» зоны (эффективная масса отрицательна).

Решение уравнений (8.20) при больших энергиях (при больших Y) дает по аналогии с записью (8.21б) следующие приближенные выражения для границ запрещенных зон:

$$\begin{aligned} \mathfrak{Z}_{2k+1} &= \left(2\pi k, 2\pi k + \frac{g}{2\pi k} \right), \\ \mathfrak{Z}_{2k+2} &= \left(\pi(2k+1) - \frac{g}{\pi(2k+1)}, \pi(2k+1) \right). \end{aligned} \quad (8.21в)$$

Таким образом, с ростом энергии запрещенные зоны становятся все уже (по переменной k), а разрешенные зоны заполняют почти всю полупрямую Y . Однако в шкале энергий ширины запрещенных зон ΔE_n оказываются не зависящими от энергии, $\Delta E_n \sim \hbar^2 g / (ma^2)$ (ширины разрешенных зон растут с энергией).

Для более реалистической модели с барьерами или ямами конечной высоты число запрещенных зон бесконечно (как и в нашем примере), однако с ростом энергии эти запрещенные зоны становятся все уже и в шкале энергий. В реальных системах нарушения периодичности, вызванные примесями и (или) конечностью решетки, приводят к исчезновению запрещенных зон при достаточно высоких энергиях электрона.

Эффективные массы. Чтобы вычислить эффективную массу в каждой зоне, достаточно разложить обе стороны уравнения (8.19) по малым отклонениям от границы зоны. При этом отклонение величины X от границы зоны выражается через энергию на границе зоны E_b и граничное значение $Y_b = a\sqrt{2mE_b/\hbar^2}$ простым соотношением:

$$\Delta Y_b = \frac{\Delta E}{2E_b} Y_b.$$

Из (8.19) для малых отклонений квазиимпульса от нуля получается соотношение

$$-\frac{q^2 a^2}{2} = \Delta Y_b \left[-\sin Y_b - \frac{g}{Y_b^2} \sin Y_b + \frac{g}{Y_b} \cos Y_b \right].$$

Определение (8.13) позволяет получить теперь

$$m^* = \frac{\hbar^2 Y_b}{2E_b a^2} \left[\left(1 + \frac{g}{Y_b^2} \right) \sin Y_b - \frac{g}{Y_b} \cos Y_b \right]. \quad (8.22a)$$

Используя (8.20), (8.21), упростим это уравнение.

Для нечетной по порядку снизу разрешенной зоны значение $q = 0$ отвечает нижнему краю зоны, для которого $Y_b = X_k^{d1}$ (первое уравнение в рамке (8.20)). Подставляя в (8.22a) решение указанного уравнения [с учетом соотношений $\sin z = \frac{2t}{1+t^2}$, $\cos z = \frac{1-t^2}{1+t^2}$, где $t = \operatorname{tg}(z/2)$] обнаруживаем, что в этой зоне эффективная масса положительна:

$$m^* = \frac{\hbar^2 g}{2E_b a^2} \left(1 + \frac{2g}{Y_b^2 + g^2} \right). \quad (8.22б)$$

Для высоко лежащих зон скобка обращается в 1, эффективная масса уменьшается как $1/E_b$.

Для четной по порядку снизу зоны значение $q = 0$ отвечает верхнему краю зоны, для которого $Y_b = 2\pi n$. При этом эффективная масса отрицательна и описывается простым соотношением

$$m^* = -\frac{\hbar^2 g}{2E_b a^2} \equiv -\frac{m^2 G a}{\hbar^2 (\pi n)^2}. \quad (8.22в)$$

С ростом энергии величина эффективной массы уменьшается как $1/E_b$.

8.2.3. Слабое периодическое поле

Рассмотрим еще случай слабого периодического поля, когда отклонение от свободного движения можно считать небольшим. Мы разберем простейший случай потенциала $V = 2V_1 \cos(2rx)$ при $r = \pi/a$.

Поле можно считать слабым, если характерная энергия V_1 мала по сравнению с расстоянием между уровнями. Но для бесконечной решетки спектр энергий непрерывен, и слова *слабое поле*, на первый взгляд, теряют смысл. Чтобы вернуть этот смысл, представим, что система помещена в ящик размером L (с дискретными уровнями энергии и периодическими граничными условиями), так что $|V_1| \ll \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$. Тогда можно использовать формулы теории возмущений для дискретного спектра, а в конце перейти к пределу $L \rightarrow \infty$. При этом, на первый взгляд, условие применимости приближения разрушается. Более детальный анализ показывает, что необходимым условием применимости подхода является лишь малость потенциала по сравнению с характерной кинетической энергией,

$$\varepsilon = |V_1| / [\hbar^2 r^2 / (2m)] = 2m |V_1| a^2 / (\pi^2 \hbar^2)^2 \ll 1.$$

Невозмущенные волновые функции — это плоские волны e^{ikx} для состояний с энергией $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$. Согласно формулам теории возмущений (5.9), первая поправка

к энергии под действием нашего возмущения обращается в ноль, и энергии состояний меняются лишь во втором порядке:

$$E(k) \rightarrow \tilde{E}(k) = E(k) + \frac{V_1^2}{E(k) - E(k - 2r)} + \frac{V_1^2}{E(k) - E(k + 2r)}.$$

Но при $k \approx \pm r$ один из знаменателей становится малым. В этой области импульсов система *близка к вырождению*, и взамен предшествующего вычисления следует использовать подход, разработанный для пары близко расположенных (резонирующих) уровней $|k\rangle$ и $|k - 2r\rangle$ при $k \approx r$ (или $|k\rangle$ и $|k + 2r\rangle$ при $k \approx -r$) (см. разд. 5.2.4). Воспользовавшись (5.16), при $k \approx r$ получим взамен $E(k)$ и $E(k - 2r)$ пару уровней:

$$\tilde{E}_{\pm}(k) = \frac{E(k) + E(k - 2r) \pm \sqrt{(E(k) - E(k - 2r))^2 + 4V_1^2}}{2}.$$

При $k = r$ энергия $\tilde{E}_+(k)$ имеет минимум, а энергия $\tilde{E}_-(k)$ — максимум, $\tilde{E}_+(r) = E(r) + |V_1|$, $\tilde{E}_-(r) = E(r) - |V_1|$. В итоге значения энергии от $\tilde{E}_-(0)$ до $\tilde{E}_-(r)$ образуют *разрешенную зону*, а от $\tilde{E}_-(r)$ до $\tilde{E}_+(r)$ — *запрещенную зону* шириной $2|V_1|$.

Получающаяся при этой диагонализации волновая функция $\psi_-(k = r, x)$ пропорциональна $e^{irx} - e^{-irx} \propto \sin(rx)$. Следовательно, при сдвиге на период решетки волновая функция меняет знак, $\psi_-(x + 2a) = -\psi_-(x)$, т. е. $\lambda_T = -1$. В силу (8.2) это значение k отвечает значению квазиимпульса $q = r = \pm\pi/a$ — верхнему краю разрешенной зоны.

▽ Итак, в случае слабого поля квазиимпульс $\hbar q$ почти не отличается от импульса $\hbar k$. Зависимость энергии от квазиимпульса (закон дисперсии) лишь слабо отличается от этой зависимости в случае свободного движения, $\tilde{E}(q) \approx E(q) + \varepsilon V_1$ до тех пор пока квазиимпульс не приближается к границам области периодичности квазиимпульса $q = \pm r$. На этих границах закон дисперсии терпит разрыв. В их окрестности зависимость энергии от квазиимпульса ниже и выше области разрыва по энергии имеет вид функций $E_-(q)$ и $E_+(q)$, определенных выше.

8.2.4. Качественная картина

Возникновение зонной структуры связано с двумя механизмами.

- Наиболее важный механизм образования зон — *обобществление состояний* множества одинаковых ям, составляющих решетку (это можно наблюдать при компьютерном моделировании, задание 2). Рассмотрим сначала уединенную яму, отвечающую одной ячейке решетки. Пусть в ней существуют уровни энергии (сверху вниз) $-E_1, -E_2, \dots, -E_k$ (в реальных кристаллах это электронные уровни энергии в ионах, в типичном случае энергия E_1 — порядка 1 эВ, энергии E_2, E_3 и последующие составляют десятки и сотни электронвольт). Если поместить рядом, на расстоянии a , еще одну точно такую же яму, то из-за туннелирования между ними каждый уровень расщепится на два, как это обсуждалось, например, в разд. 5.3.8. Величина расщепления ΔE_k связана с *коэффициентом туннелирования между ямами* D_k соотношением

$$\Delta E_k \sim D_k |E_k|, \quad D_k \approx e^{(-2 \int \sqrt{2m|E_k - V|} dx / \hbar)}, \quad (8.23)$$

где интеграл берется по области между точками поворота соседних ям ($\lesssim a$). Состояния, отвечающие этим уровням, не локализованы вблизи одной из ям, а распределены между ямами (для двух ям одно из состояний симметрично, а другое антисимметрично по переходу между ямами).

При добавлении третьей, четвертой, ... таких же ям полное число уровней сохраняется, так что каждый из «родительских» уровней расщепляется на 3, 4, ... уровня в пределах того же интервала энергий $\sim \Delta E_k$, т. е. появляются *разрешенные энергетические зоны*. Собственные состояния, отвечающие каждому из этих значений энергии, распределены по всем ямам. В решетке из N элементарных ячеек каждая зона содержит N уровней.

При оценке ширины зоны (8.23) полезно использовать грубое понимание структуры атома, доставляемое изучением атома водорода, § 7.3.

Для *верхней зоны* эффективное расстояние между точками поворота не очень велико. Действительно, соответствующие электроны отвечают наибольшему значению квантового числа n , а поле ядра экранируется остальными электронами, так что эффективный заряд ядра в оценках (7.20) $Z = 1$. Поэтому эффективный коэффициент туннелирования не слишком мал, и верхние из разрешенных зон — относительно широкие.

Для *нижних зон* квантовое число n меньше, чем для верхнего уровня, а эффективный заряд ядра больше 1 (меньше электронов участвует в экранировании). Поэтому эффективное расстояние между точками поворота приближается к максимально возможному значению — расстоянию между ионами (параметру решетки) a . Для этих уровней увеличивается по величине и второй множитель под интегралом коэффициента туннелирования. В большей части классически запрещенной области, определяющей коэффициент туннелирования, $|E_k| \gg |V|$, поэтому, делая оценки, можно принимать $D_k \approx \exp(-2a\sqrt{2m|E_k|}/\hbar)$. В итоге коэффициент туннелирования D_k становится очень малым. В частности, для Al и Si объем одного грамм-атома составляет примерно 10 см^3 . Поэтому среднее межатомное расстояние в таком кристалле составляет примерно $2,5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$. Для энергии $E_k \approx -10 \text{ эВ}$ величина $\hbar/\sqrt{2m|E|} \approx 0,6 \cdot 10^{-8} \text{ см}$. Поэтому для такой энергии уровня $D_k \approx e^{-8} \approx 0,0003$, что дает очень малую ширину зоны $\Delta E_k \approx 0,003 \text{ эВ}$. Точно так же, при переходе к более глубокому уровню с энергией -100 эВ ширина зоны составит ничтожно малую величину $\Delta E \sim 10^{-9} \text{ эВ}$. Таким образом, набор разрешенных энергий глубоко расположенных зон практически не отличается от N -кратно тиражированного набора энергий уровней изолированных ионов.

Обсудим теперь локализацию электрона в решетке для нижних зон более подробно. Если электрон первоначально локализован вблизи одного из ионов, его состояние было суперпозицией очень чистых состояний, отвечающих определенным очень близким друг к другу значениям энергии. Электрон смещается к другому иону за время, которое очень велико для глубоко расположенных уровней. В частности, для глубоко расположенных очень узких зон эффективные массы «электронов» чудовищно велики $m_k \sim \hbar^2/(\Delta E_k a^2)$, соответственно велики и времена движения между ячейками.

По-видимому еще более важно, что нарушения периодичности (дислокации, примеси, колебания решетки) приводят к тому, что уровни энергии электронов в сосед-

них квазиуединенных ионах начинают различаться. В соответствии с обсуждением в разд. 5.3.8 для пары ям, пока такое различие невелико, обобществление уровней в зону лишь немного отличается от того, что происходит в идеальной решетке. Если же оно превосходит ожидаемую ширину зоны (8.23), то обобществления уровней не происходит, и это есть дополнительный источник локализации глубоко сидящих электронов.

Итак, для глубоко лежащих состояний концепция локализованных состояний адекватно описывает ситуацию. Для верхних зон ситуацию адекватно описывает концепция блоховских волн, бегущих по решетке.

- Помимо этого, периодичность потенциала приводит к возникновению узких (их ширина уменьшается с ростом E) запрещенных зон еще и высоко в пределах непрерывного спектра — подобно дифракционным максимумам высокого порядка при дифракции на периодической решетке. На первый взгляд, это нарушает принцип соответствия — *при больших энергиях картина должна совпадать с классической, неровности потенциала не должны быть заметны*. В действительности такого нарушения нет, при достаточно больших энергиях высокоэнергетические запрещенные зоны исчезают из-за конечности размеров кристалла и небольших нарушений периодичности.

§ 8.3. Малые колебания линейных цепочек

При нулевой температуре можно считать, что все ионы кристалла находятся в равновесии, их потенциальные энергии минимальны, и малые отклонения от равновесия увеличивают эти энергии на величины, пропорциональные квадратам смещений. Поэтому разумной моделью кристалла является система грузиков, отвечающих ионам, и пружинок, отвечающих возвращающим силам. Массы грузиков отвечают массам ионов, а «жесткости» возвращающих сил определяются взаимодействием ионов и их электронного окружения друг с другом. Далее, говоря об ионах, мы будем иметь в виду именно такую механическую модель.

Чтобы понять основные черты возникающей картины, мы ограничимся в расчетах изучением одномерной задачи, т. е. рассмотрим цепочку из большого числа N одинаковых молекул (состоящих из одного или двух атомов), расположенных вдоль оси x и двигающихся вдоль этой оси.

В курсах механики (см. например, [13]) эти задачи часто изучают с помощью уравнений Ньютона — Лагранжа. Мы используем метод диагонализации Гамильтона, более удобный для квантования.

8.3.1. Цепочка одноатомных молекул

В задаче о простейшем кристалле рассматривается цепочка ионов с массой m , связанных пружинками одинаковой жесткости $k = m\omega_0^2$, рис. 8.1. В равновесии ионы расположены в точках $x_n = na$ (n — целые). Их смещения от положений равновесия обозначаем через $u_n \equiv u(x_n)$.

Здесь элементарной ячейкой можно считать один ион и одну «пружинку» слева от иона, или ион и половинки пружинки, связанных с ним, или пружинку и поло-

винки ионов, связанных с ней. Результат не зависит от выбора (который не должен меняться в процессе рассмотрения задачи).

• **Классическое рассмотрение.**

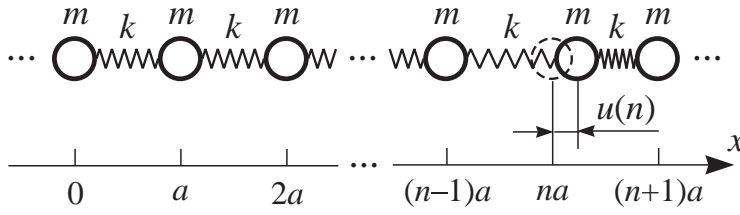


Рис. 8.1. Линейная цепочка

Полная энергия системы (*функция Гамильтона* — гамильтониан) есть

$$\begin{aligned} H &= \sum_n \left[\frac{p_n^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2} (u_n - u_{n+1})^2 \right] \equiv \\ &\equiv \sum \left[\frac{p_n p_n^*}{2m} + \frac{m\omega_0^2 (u_n - u_{n+1})(u_n^* - u_{n+1}^*)}{2} \right]. \end{aligned} \quad (8.24)$$

Вторая запись эквивалентна первой, т. к. импульсы и смещения действительны, но она удобна для дальнейших преобразований.

Этот гамильтониан неудобен для исследования, т. к. здесь перепутаны смещения всех ионов. Чтобы улучшить дело, разложим координаты и импульсы ионов по собственным функциям оператора конечного сдвига для решетки из N ионов с периодическими граничными условиями. В нашем случае это просто преобразование Фурье (с учетом того, что квазиимпульс принимает значения $q = 2\pi r/(Na)$ (8.46)) (обратите внимание на разные знаки показателей экспонент для координаты и импульса):

$$\begin{aligned} U(q) &= \frac{\sum_n u_n e^{iqx_n}}{\sqrt{N}}, & u_n &= \frac{\sum_q U(q) e^{-iqx_n}}{\sqrt{N}}; \\ P(q) &= \frac{\sum_n p_n e^{-iqx_n}}{\sqrt{N}}, & p_n &= \frac{\sum_q P(q) e^{iqx_n}}{\sqrt{N}}. \end{aligned} \quad (8.25)$$

Определенные здесь величины $U(q)$, $P(q)$ комплексны и

$$\begin{aligned} U^*(q) &= U(-q), & P^*(q) &= P(-q); \\ u_n - u_{n+1} &= \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q U(q) e^{-iqx_n} (1 - e^{-iqa}). \end{aligned} \quad (8.26)$$

Подставим эти выражения во вторую форму функции Гамильтона (8.24). С учетом условий ортонормированности для преобразований Фурье в этом представлении

функция Гамильтона диагонализуется:

$$H = \sum_q \mathcal{H}(q),$$

$$\mathcal{H}(q) = \frac{P(q)P^*(q)}{2m} + \frac{2m\omega_0^2(1 - \cos qa)U(q)U^*(q)}{2}. \quad (8.27)$$

Гамильтониан колеблющейся решетки превратился в сумму гамильтонианов невзаимодействующих осцилляторов $\mathcal{H}(q)$, т. е. задача свелась к описанию системы независимых осцилляторов — *нормальных колебаний* с частотами

$$\omega \equiv \omega(q) = 2\omega_0 |\sin(qa/2)|. \quad (8.28a)$$

Здесь имеется вырождение по знаку q — в соответствии с теоремой Крамера. Видно, что при небольших q с хорошей точностью

$$\omega(q) = Cq; \quad C = \omega_0 a. \quad (8.28b)$$

Это соответствует звуковым волнам со скоростью звука C .

Собственные векторы, отвечающие разным квазиимпульсам, — *нормальные колебания* — бегущие волны (8.25).

• **Квантовое описание.** Преобразование Фурье (8.25) не перемешивает координаты и импульсы. Поэтому представление (8.27) получается и в квантовом случае. Кроме того, для компонент Фурье $U(q)$ и $P(q)$ имеют место те же перестановочные соотношения (1.20), что и для отдельных координат и импульсов частиц:

$$[P(q), U(q')] = -i\hbar\delta_{qq'}. \quad (8.29)$$

В итоге для описания состояний каждого из получившихся осцилляторов применимо все описание гл. 4. В частности, по образцу (4.3) и обозначая $P_{q0} = \sqrt{\hbar m \omega(q)}$, $U_{q0} = \hbar/P_{q0}$, удобно ввести операторы:

$$\hat{b}(q) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{U}(q)}{U_{q0}} + i \frac{\hat{P}(q)}{P_{q0}} \right); \quad \hat{b}^+(q) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{U}^+(q)}{U_{q0}} - i \frac{\hat{P}(q)}{P_{q0}} \right). \quad (8.30)$$

Операторы $\hat{U}(q)$ и $\hat{P}(q)$ легко выражаются через $\hat{b}(q)$ и $\hat{b}^+(q)$. Подстановка этих выражений преобразует гамильтониан (8.27) к виду

$$\hat{H} = \int dq \hbar \omega(q) \left(\hat{b}^+(q) \hat{b}(q) + \frac{1}{2} \right). \quad (8.31)$$

Для каждого нормального колебания с частотой $\omega(q)$ (8.28a) возможные энергии стационарных состояний имеют хорошо известный вид $E(q) = \hbar \omega(q)(n_q + 1/2)$ с целыми n_q . Волновые функции вида (4.20) определены в координатах $U(q)$, связь которых со смещениями задается преобразованием (8.25).

Отдельные возбуждения независимых осцилляторов («виброны» гл. 4) в этом случае называются *фононами*. Это — кванты волн, распространяющихся по решетке, их закон дисперсии имеет вид (8.28a). Операторы $\hat{b}(q)$ и $\hat{b}^+(q)$ — операторы

уничтожения и рождения фононов данного типа. Здесь применимы все результаты, полученные ранее для линейного осциллятора. В частности, произвольное состояние колебаний нашей цепочки можно определять набором натуральных чисел, обозначающих число фононов в каждом из состояний (вторичное квантование — см. § 12.2).

8.3.2. Цепочка двухатомных молекул

Рассмотрим цепочку двухатомных «молекул», состоящих из одинаковых «ионов» с массой m , связанных пружинками длины a чередующейся жесткости $k_1 = m\omega_1^2$ и $k_2 = m\omega_2^2$. При $k_1 > k_2$ естественно считать «молекулой» пару ионов, связанных пружинкой жесткости k_1 , а пружинки жесткости k_2 сопоставлять с межмолекулярными связями.

• **Двухатомная молекула в жестком кристалле.** Обсудим сначала простейшую модель: 2 одинаковых иона, связанных пружинкой k_1 и соединенных со стенками справа и слева пружинками меньшей жесткости k_2 , смещения этих ионов от положения равновесия обозначаются u_1 и u_2 соответственно. Гамильтониан этой «молекулы»

$$\hat{H} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{m\omega_1^2(u_1 - u_2)^2}{2} + \frac{m\omega_2^2(u_1^2 + u_2^2)}{2}. \quad (8.32a)$$

Перейдем к комбинированным смещениям

$$u_{\pm} = (u_1 \pm u_2)/\sqrt{2} \quad (8.32b)$$

и соответствующим импульсам. В этих координатах наш гамильтониан разбивается на сумму гамильтонианов \hat{H}_+ , описывающего движение «молекулы» как целого (движение центра масс), и \hat{H}_- , описывающего относительное движение «атомов» в «молекуле» — симметричные колебания относительно центра тяжести:

$$u_{\pm} = \frac{u_1 \pm u_2}{\sqrt{2}} \Rightarrow \hat{H} = \hat{H}_+ + \hat{H}_-, \quad (8.32в)$$

$$\hat{H}_{\pm} = \frac{p_{\pm}^2}{2m} + \frac{m\omega_{\pm}^2 u_{\pm}^2}{2}, \quad \omega_-^2 = 2\omega_1^2 + \omega_2^2, \quad \omega_+ = \omega_2.$$

Нетрудно проверить, что использованные преобразования сохраняют для новых смещений и импульсов те же перестановочные соотношения (1.20), что и для исходных, ср. (8.29). Поэтому для описания состояний каждого из осцилляторов достаточно повторить сказанное в гл. 4.

Итак, частота колебаний «молекулы» как целого ω_+ определяется только жесткостью «внешних» связей «молекулы», она относительно невелика. Частота «колебаний ионов в молекуле» ω_- относительно велика. (У свободной молекулы это были бы обычные колебания с частотой $\omega_1\sqrt{2}$.)

• **Гамильтониан цепочки двухатомных молекул** имеет вид

$$H = \sum_n \left[\frac{p_{2n}^2}{2m} + \frac{p_{2n+1}^2}{2m} + \frac{k_1 \Delta_{2n}^2}{2} + \frac{k_2 \Delta_{2n-1}^2}{2} \right], \quad (8.33)$$

где $\Delta_B = u_{B+1} - u_B$.

(«Пружинки» $(2n) - (2n + 1)$ отвечают связям внутри «молекулы», а «пружинки» $(2n) - (2n - 1)$ — межмолекулярным связям.) Здесь за элементарную ячейку можно принять отрезок от четного иона до следующего четного иона, или от нечетного до нечетного, или другой повторяющийся отрезок длины $2a$, т. е. мы обозначаем $x_n = 2na$.

Разложение по собственным функциям оператора конечного сдвига (разложение Фурье) вида (8.25) выполняется отдельно для смещений четных (ev) и нечетных (od) частиц:

$$u_{2n} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q U_{ev}(q) e^{-iqx_n}, \quad u_{2n+1} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q U_{od}(q) e^{-iq(x_n+a)},$$

$$p_{2n} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q P_{ev}(q) e^{iqx_n}, \quad p_{2n+1} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q P_{od}(q) e^{iq(x_n+a)}.$$

(Дополнительный сдвиг аргумента у координат нечетной частицы учитывает реальное расстояние между соседями. Обратные преобразования выписываются по образцу (8.25).)

Подстановка этих выражений в гамильтониан преобразует его, подобно (8.27), в сумму гамильтонианов пар связанных осцилляторов, отвечающих отдельным значениям квазиимпульса:

$$H = \sum_q \mathcal{H}(q), \quad (8.34a)$$

$$\text{где} \quad \mathcal{H}(q) = \frac{P_{ev}(q)P_{ev}^*(q)}{2m} + \frac{P_{od}(q)P_{od}^*(q)}{2m} +$$

$$+ m \frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2} [U_{ev}(q)U_{ev}^*(q) + U_{od}(q)U_{od}^*(q)] -$$

$$- m \frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2} \cos(qa) [U_{ev}(q)U_{od}^*(q) + U_{od}(q)U_{ev}^*(q)] -$$

$$- im \frac{\omega_1^2 - \omega_2^2}{2} \sin(qa) [U_{ev}(q)U_{od}^*(q) - U_{od}(q)U_{ev}^*(q)].$$

Таким образом, гамильтониан преобразован в сумму гамильтонианов систем с двумя степенями свободы каждый $\mathcal{H}(q)$, чьи параметры зависят от квазиимпульса q , пробегającego значения (8.4б) (частично диагонализирован). Каждый из этих гамильтонианов напоминает гамильтониан уединенной молекулы (8.32) и обладает теми же свойствами симметрии¹.

Далее гамильтониан $\mathcal{H}(q)$ преобразуется к диагональной форме:

$$\mathcal{H}(q) = \mathcal{H}_+(q) + \mathcal{H}_-(q), \quad \mathcal{H}_\pm(q) = \frac{P_\pm^2}{2m} + \frac{m\omega_\pm^2(q)U_\pm^2(q)}{2}, \quad (8.35a)$$

¹На первый взгляд гамильтониан $\mathcal{H}(q)$ кажется неэрмитовым (появилась мнимая часть). Однако, это гамильтониан системы с двумя степенями свободы, и эрмитово сопряжение включает не только замену $i \rightarrow -i$, но и замену $u_{ev} \leftrightarrow u_{od}$. При этих двух заменах гамильтониан $\mathcal{H}(q)$ не меняется.

с помощью преобразований (ср. (8.32б))

$$U_{\pm}(q) = \frac{U_{ev}(q)e^{i\phi} \pm U_{od}(q)e^{-i\phi}}{\sqrt{2}}, \quad P_{\pm}(q) = \frac{P_{ev}(q)e^{-i\phi} \pm P_{od}(q)e^{i\phi}}{\sqrt{2}}. \quad (8.35б)$$

(Разумеется, подобная диагонализация возможна и при неравных массах ионов, мы не выписываем соответствующие более громоздкие формулы.)

Нетрудно проверить, что использованные преобразования сохраняют для новых смещений $U(q)$ и импульсов $P(q)$ те же перестановочные соотношения (1.20), что и для исходных.

Угол ϕ и частоты нормальных осцилляторов определяются стандартным образом (диагонализация квадратичной формы потенциальной энергии):

$$tg2\phi = \frac{\omega_1^2 - \omega_2^2}{\omega_1^2 + \omega_2^2} tg(qa), \quad (8.35в)$$

$$\omega_{\pm}^2 = \omega_1^2 + \omega_2^2 \mp \sqrt{(\omega_1^2 + \omega_2^2)^2 - 4\omega_1^2\omega_2^2 \sin^2(qa)}.$$

Этот спектр изображен на рис. 6.2.

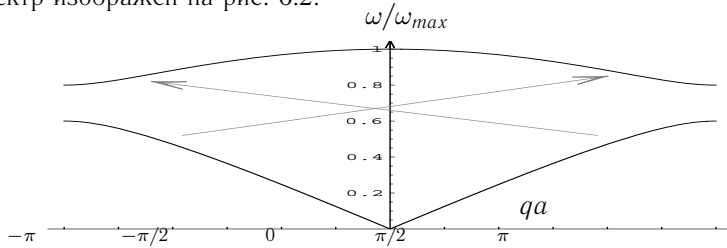


Рис. 8.2. Две ветви колебаний при $\omega_2 = 3\omega_1/4$.

◇ При небольших q получается

$$\omega_+^2 \approx \frac{2\omega_1^2\omega_2^2}{\omega_1^2 + \omega_2^2} \sin^2(qa), \quad \omega_-^2 \approx 2(\omega_1^2 + \omega_2^2). \quad (8.36)$$

В соответствии с (8.35б) в колебаниях с частотами ω_+ соседние ионы смещаются в одну сторону, среда колеблется как целое. Эти колебания называют *акустическими*¹, т. к. при небольших q их частота пропорциональна квазиимпульсу (скорость звука $C = 2a\omega_1\omega_2/\sqrt{2(\omega_1^2 + \omega_2^2)}$). С ростом квазиимпульса закон дисперсии звуковых колебаний отклоняется от линейного. Напротив, колебания ω_- — высокочастотные, в этих колебаниях соседние ионы колеблются в противоположные стороны (противофазно). Такие колебания могут возбуждаться электромагнитной волной

¹Существование акустической ветви колебаний — чрезвычайно общий факт. Н. Н. Боголюбов доказал это, предполагая только, что элементарные взаимодействия частиц, образовавших вещество, быстро убывают с расстоянием. Частный случай этого утверждения (открытый позднее) известен ныне как теорема Голдстоуна. Условие теоремы Боголюбова не выполняется в плазме — кулоновское взаимодействие заряженных частиц убывает с расстоянием медленно. Из-за этого в полностью ионизированной плазме акустические колебания заменяются на плазменные, у которых наименьшая частота — не ноль.

с длиной волны $\sim a$ — светом. Поэтому их называют *оптическими* (оптическая ветвь колебаний). С ростом квазиимпульса частота этих колебаний медленно убывает.

◇ Полезно рассмотреть случай $k_1 \gg k_2$. Тогда закон дисперсии (8.36) для ω_+ переходит в закон (8.28а) для «молекул» с массой $2m$, связанных «пружинками» жесткости k_2 , т. е. с заменой $m \rightarrow 2m$, $k \rightarrow k_2$. В то же время закон дисперсии (8.36) для ω_- переходит в соотношение $\omega_- = \omega_1 \sqrt{2}$ для отдельных молекул. Это частный случай общего утверждения, что *спектр оптических колебаний воспроизводит спектр собственных колебаний уединенной молекулы* с «размазкой», которая определяется жесткостью связей.

◇ При $k_2 \rightarrow k_1$ скачком меняется симметрия — размер элементарной ячейки уменьшается вдвое, и наша цепочка превращается в рассмотренную ранее цепочку одноатомных молекул (в которой мы приняли за размер элементарной ячейки $2a$ вместо a). В частности, при этом $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega_0$, и мы имеем $\omega_{\pm}^2 = 2\omega_0^2(1 \pm \cos(qa))$.

Две ветви колебаний получатся в этом случае из дисперсионной кривой случая одноатомных молекул следующим образом. Поскольку мы удвоили длину элементарной ячейки, интервал изменения квазиимпульса уменьшился вдвое. Поэтому следует считать, что квазиимпульс меняется только в интервале $-\pi/2a < q < \pi/2a$. Часть дисперсионной кривой для одноатомных молекул, расположенная внутри этого интервала, отображается теперь как акустическая ветвь колебаний. В соответствии с определением квазиимпульса, его значения в интервале $\pi/2a < q < \pi/a$ следует рассматривать как $q - \pi/a$, они попадают в интервал $(-\pi/2a, 0)$, а значения квазиимпульса в интервале $-\pi/a < q < -\pi/2a$ следует рассматривать как $q + \pi/a$, они попадают в интервал $(0, \pi/2a)$ (*переброс*). Так возникают две половины оптической ветви в нашем случае. (Переход к случаю $k_2 = k_1$ схематически изображен стрелочками на рис. 6.1.)

● Переход к бесконечной цепочке описывается заменой сумм (8.27), (8.34) на интегралы $\frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq \mathcal{H}(q)$. При этом *величину $\mathcal{H}(q)$ называют плотностью гамильтониана в импульсном пространстве*.

● **Квантовое рассмотрение** повторяет все, что было сказано для цепочки одноатомных молекул. Единственное отличие состоит в том, что теперь в системе появляются две ветви спектра колебаний рис. 6.1 и, соответственно, два типа операторов рождения и уничтожения, отвечающих акустической и оптической ветвям колебаний (два типа фононов).

§ 8.4. Следствия нарушения периодичности

■ В реальных системах число элементарных ячеек N конечно. Выше мы рассмотрели случай периодических граничных условий. Для других граничных условий решения меняются. Например, решения для цепочки с закрепленными концами выглядят как стоячие волны — суперпозиции решений для кольцевой цепочки. При этом исчезает вырождение $q \rightarrow -q$, и достаточно рассматривать только положительные q , зато точки на кривой $\omega(q)$ расположены вдвое чаще — появляются решения

с нечетным числом полувольт, не допускающие гладкого периодического продолжения. Тем не менее, в пределе больших N основные свойства набора частот и закон дисперсии колебаний решетки не зависят от конкретной формы граничных условий.

■ Обсудим теперь, как нарушения периодичности влияют на состояния электронов в кристалле. Мы разберем простейший пример, когда ось x разделяется на три участка, «левый» ($x < -b$), «правый» ($x > b$) и «центральный» ($|x| < b$) так, что левый и правый участки представляют собой периодические структуры, ограниченные при $x = \pm a$, а на центральном участке реализуется своя зависимость потенциала от координат $V_c(x)$. Если левый и правый участки обладают одинаковой периодичностью, а $V_c = 0$, то говорят о *вакансии*, при потенциале $V_c(x)$, отличном от нуля, но нарушающем периодичность, говорят о *примеси*, в случае же когда просто размер центральной области $2b$ отличается от параметра ячейки a , говорят о *дислокации*. Наше построение работает и в том случае, когда периодичности справа и слева не совпадают. Это отвечает либо контакту двух кристаллических структур, либо ограниченному с одной стороны кристаллу (в этом случае с одной стороны — для определенности слева — мы имеем вакуум). В таких задачах центральный участок может отсутствовать.

• *Выберем какое-нибудь значение E . В левой области* будем искать решение в виде суперпозиции двух линейно независимых решений уравнения Шредингера Ψ_1 и Ψ_2 , отвечающих двум возможным значениям параметра периодичности λ_T , которые получаются из уравнения (8.11).

◆ Если энергия электрона такова, что $|\Lambda(E)| \leq 1$, то, как и в § 8.2, можно обозначить $\Lambda(E) = \cos qa$, что соответствует $\lambda_T = e^{iqa}$, т. е. мы имеем дело со знакомыми решениями для полностью периодического поля, отвечающими волне, распространяющейся направо или налево. (При $dE/dq > 0$ движение вправо отвечает положительным значениям квазиимпульса, а влево — отрицательным.)

◆ В отличие от случая чисто периодического поля, в рассматриваемом случае нет причин для исключения решений с такими энергиями, что $|\Lambda(E)| > 1$, и следует рассмотреть решения уравнения (8.11) в этом случае. Обозначив $\Lambda(E) = \pm ch \kappa a$ с $\kappa > 0$, найдем два решения, $\lambda_T = \pm e^{-\kappa a}$ и $\lambda_T = \pm e^{\kappa a}$. Они отвечают соответственно возрастанию и убыванию амплитуды волновой функции на каждой следующей ячейке при удалении от границы (аналоги растущей и падающей экспонент в классически недостижимой области для задачи о прямоугольной яме). В чисто периодической структуре оба этих поведения были запрещены, т. к. получался неограниченный рост либо при $x \rightarrow \infty$, либо при $x \rightarrow -\infty$. В рассматриваемом случае недопустим только рост при $x \rightarrow -\infty$. Поэтому может реализоваться решение, убывающее при отходе от границы, с $\lambda_T = \pm e^{\kappa a}$.

Далее построим подобные решения в правой области $x > b$. Затем решим уравнение Шредингера в центральной области и произведем сшивку всех трех решений, используя условия непрерывности волновой функции и ее производной, как это делалось в задаче о прямоугольном барьере (2.16) или в квазиклассической задаче (5.27).

◇ Если *периодичности справа и слева совпадают*, то получающаяся картина напоминает ту, что возникала при описании электрона в поле потенциальной ямы или горба.

∇ Для значения энергии, принадлежащего к разрешенной зоне, решение (суперпозиция волн с положительным и отрицательным квазиимпульсом) можно представить как волну, вышедшую, например, слева плюс отраженная (налево) волна и волну, прошедшую направо — в точности как в задаче о рассеянии над потенциальной ямой или горбом.

∇ Если энергия отвечает запрещенной зоне, то, стартуя от решения, убывающего с отходом от границы влево в левой зоне, после сшивок на границах $-a$ и a мы придем в правой к зоне к решению, содержащему и убывающий и растущий при движении направо вклады. Реализоваться может только то решение, которое убывает при движении направо. Условие обращения в ноль коэффициента при растущем направо вкладе определяет значение энергии, отвечающей *примесному или вакансионному уровню*, который локализован вблизи области нарушения периодичности, $x \sim 0$ (и в левой и в правой областях амплитуда волновой функции убывает при отходе от границы раздела по закону $e^{-n|x|}$, где n — число ячеек периодичности, отсчитанное от границы раздела).

◇ Если *периодичности справа и слева не совпадают*, то вне зависимости от существования центрального участка при различных энергиях реализуются различные возможности.

∇ И для левого и для правого участков в уравнении (8.11) $|\Lambda(E)| \leq 1$, т. е. и справа и слева могут распространяться блоховские волны с различными значениями квазиимпульса $q_\ell(E)$ и $q_r(E)$. В этом случае имеет место обсуждавшаяся выше картина падения волны на границу с отражением и прохождением через границу, дополненная изменением скорости волны при прохождении границы.

∇ Для левого участка в уравнении (8.11) $|\Lambda_\ell(E)| \leq 1$, а для правого оказалось $|\Lambda_r(E)| > 1$. При этом падающая на границу слева волна полностью отражается от нее, вблизи от границы справа имеется некоторая плотность электронной волны, подобная затухающей волне при полном внутреннем отражении или скин-эффекте. При некоторых значениях энергии могут возникать аналоги нестабильных состояний (ср. разд. 2.4.5) с волновой функцией, в основном сосредоточенной вблизи границы раздела и имеющей небольшую по амплитуде волновую компоненту, уходящую налево. (Разумеется, подобная картина может реализоваться и при переходе справа налево.)

∇ И для левого и для правого участков в уравнении (8.11) $|\Lambda(E)| > 1$, т. е. и справа и слева волновых решений нет. В этом случае, как и выше, могут появиться уровни, локализованные вблизи границы раздела.

◇ В частности, для *кристалла с границей*, например слева имеется область свободного движения. Тогда перечисленные возможности отвечают следующим явлениям.

∇ При некоторых энергиях электроны могут переходить из вакуума в кристалл и обратно с естественным частичным отражением на границе.

∇ При энергиях $E > 0$, отвечающих запрещенным зонам в кристалле, электронные волны могут распространяться в вакууме, но не проходят в кристалл, отражаясь от границы.

∇ При энергиях $E < 0$, отвечающих разрешенным зонам в кристалле, электронные волны могут распространяться в кристалле, но не выходят из него, отражаясь

от границы.

∇ При некоторых значениях энергии $E < 0$, отвечающих запрещенным зонам в кристалле, могут появиться связанные состояния, локализованные вблизи границы (*поверхностные состояния — поверхностные уровни*) (И. Е. Тамм).

Подобным образом можно изучать и неоднократные нарушения периодичности.

§ 8.5. Квазичастицы

В реальном кристалле электроны сильно взаимодействуют между собой. На первый взгляд, это делает бесполезным представление об одиноком электроном, путешествующем сквозь периодический потенциал решетки. Оказалось, однако, что интересующие нас электронные свойства кристалла очень хорошо описываются с помощью понятия о *квазичастицах* — элементарных возбуждениях над основным состоянием всего коллектива составляющих кристалл частиц. При не слишком высоких температурах таких квазичастиц не очень много, и они слабо взаимодействуют между собой. Основные черты энергетического спектра квазичастиц определяются периодичностью кристалла, т. е. совпадают с теми, которые мы только что рассмотрели.

Перечислим некоторые типы квазичастиц в твердом теле:

1. *Электроны и дырки* — возбуждения, обсуждавшиеся в § 8.2, см. (8.13). Электроны — это возбуждения вблизи дна зоны с положительной эффективной массой. Дырки — свободные места вблизи потолка этой зоны. Их можно описывать как квазичастицы с *положительной* массой, но *отрицательным* зарядом.
2. *Фононы* — кванты нормальных колебаний решетки (разных бегущих волн). В трехмерном кристалле у них появляется дополнительная степень свободы — *поляризация* (продольная и две поперечных).
3. *Магноны* — кванты спиновых волн — колебаний магнитного момента атомов кристалла.
4. *Экситоны* в диэлектриках и полупроводниках — связанные состояния дырки и электрона из вышележащей зоны (похожие на атом водорода).

§ 8.6. Некоторые черты трехмерной решетки

Идеальная решетка

■ Трансляционная симметрия

Идеальная периодическая решетка — пространство, заполненное одинаковыми элементарными «кирпичиками». Такой минимальный «кирпичик», который, бесконечно повторяясь, заполняет все пространство без пропусков и наложений, называется *элементарной ячейкой*. Выбор ее неоднозначен уже в одномерном случае. В трехмерном случае к неоднозначности выбора «края» ячейки добавляется неоднозначность выбора основных направлений — *базисных кристаллографических осей*. Так, для кристалла $NaCl$ можно считать элементарной ячейкой куб Na с Cl в центре или куб Cl с Na в центре, или наклонный параллелепипед Na , у которого

одна сторона совпадает со стороной куба, другая направлена по диагонали грани куба, а Cl расположен на наклонной грани, и т. д.

Выбирая в каждой из заполнивших пространство примитивных ячеек одинаково расположенную опорную точку, мы получаем множество точек, связанных между собой *векторами трансляций*:

$$\mathbf{T} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (8.37)$$

где n_i — целые числа, а некопланарные векторы \mathbf{a}_i называют *векторами примитивных трансляций*. Параллелепипед, построенный на векторах \mathbf{a}_i , называют *примитивной ячейкой*. Ее объем $V_c = \mathbf{a}_1 (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$. Векторы примитивных трансляций обычно направляют из опорной точки, связанной с каким-нибудь ионом, в места расположения других ионов. Последние можно выбирать по-разному. (Это — линейные комбинации первоначальных векторов \mathbf{a}_i , сохраняющие объем примитивной ячейки.)

■ Точечная симметрия

Кристаллическая решетка обладает точечной симметрией, т. е. переходит сама в себя под действием операций симметрии, оставляющих на месте одну из ее точек. Таким операциям соответствуют *элементы симметрии*:

- вращение на угол $2\pi/n$ — ось вращения n -го порядка;
- зеркальное отражение — плоскость отражения;
- инверсия — центр инверсии.

Сочетание различных элементов симметрии приводит к дополнительным элементам. Например, если через ось вращения n -го порядка проходит плоскость отражения, то существует еще $n - 1$ такая плоскость. Полная совокупность операций точечной симметрии пространственного объекта образует *точечную группу* преобразований объекта.

Жесткие ограничения возникают из требования совместимости операций точечной и трансляционной симметрии. В частности, наличие оси симметрии с $n > 2$ означает, что элементарная ячейка имеет форму правильного n -угольника с углом при вершине $\pi(n-2)/n$. Плоскость перекрывается без перекрытий и пустот, если в одной вершине сходится конечное число k таких многоугольников так, что $k\pi(n-2)/n = 2\pi$, т. е. $2n/(n-2)$ — целое число. условие имеет решения только при $n = 3, 4, 6$ (и формально при $n = 2$). Поэтому в кристаллах могут существовать оси вращения только 2-го, 3-го, 4-го и 6-го порядков.

Полный набор операций точечной и трансляционной симметрии данного кристалла составляет его *пространственную группу*. Кристаллографы перечислили все возможные пространственные группы кристаллов. Их оказалось 230, а более фундаментальных типов решеток (решеток Бравэ) — всего 14.

Обсуждавшийся кристалл $NaCl$ обладает высокой — кубической — симметрией (гранцентрированная кубическая решетка). Подобная кубическая симметрия (простые, гранцентрированные либо объемноцентрированные решетки) характерна и для большинства металлов. У важнейших полупроводников (Si, Ge, GaAs, InSb и т. д.) кристаллическая решетка имеет вид пары гранцентрированных кубических

подрешеток, сдвинутых друг относительно друга вдоль главной диагонали куба на $1/4$ ее длины. Если подрешетки состоят из одинаковых ионов, говорят о решетке типа алмаза, а если из разных — о решетке типа цинковой обманки. Часто встречается и гексагональная симметрия, например, у графита и льда.

Обратная решетка

Волна в кристалле характеризуется квазиимпульсом $\hbar\mathbf{q}$. Значения квазиимпульса, различающиеся на величины $2\pi\hbar n/a$, отвечают одной и той же физической реальности. Поэтому пространство квазиимпульсов, *обратное пространство*, подобно кристаллу разбивается на эквивалентные друг другу ячейки — *элементарные ячейки обратной решетки*. Они подобны элементарным ячейкам в x -пространстве, и выбирать элементарную ячейку обратной решетки можно по-разному.

Векторы *обратной решетки* \mathbf{G} определяются условиями

$$e^{i\mathbf{G}(\mathbf{r}+\mathbf{T})} = e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} \Rightarrow (\mathbf{G}\mathbf{T}) = 2\pi n \quad (n \text{ — целое}). \quad (8.38)$$

Набор векторов обратной решетки подобен набору векторов трансляций в обычном пространстве (8.37), он образует узлы обратной решетки кристалла, подобные положениям ионов прямой решетки. Легко сообразить, что прямая и обратная решетки обладают одинаковой симметрией.

Вектор \mathbf{G} можно разложить по *векторам примитивной обратной решетки* \mathbf{b}_i . Обычно эти векторы выбирают в соответствии с векторами примитивной решетки (8.37):

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)/V_c; & \mathbf{b}_2 &= 2\pi(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)/V_c; \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)/V_c. \end{aligned} \quad (8.39)$$

При этом $\mathbf{G} = n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3$, где n_1, n_2, n_3 — целые числа. Если векторы $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ и \mathbf{a}_3 перпендикулярны друг другу, то обобщение ограничения (8.3) на возможные значения волнового вектора можно записать в виде

$$-b_i^2 < 2(\mathbf{q} \mathbf{b}_i) < q_i^2.$$

Примитивную элементарную ячейку в пространстве квазиимпульсов можно выбирать по-разному. Среди различных вариантов выбора этой ячейки выделенную роль играет многогранник, который называют (первой) *зоной Бриллюэна* — трехмерное обобщение интервала $(-\pi/a, \pi/a)$ (8.4), использовавшегося для линейной цепочки. Это — *совокупность всех точек k -пространства, лежащих ближе к точке $\mathbf{k} = 0$, чем к любой другой точке обратной решетки*. Зона Бриллюэна обладает точечной симметрией прямой решетки. Получающаяся в пределах этой зоны форма поверхности равной энергии может оказаться очень сложной.

По смыслу определения (8.38), каждый из векторов обратной решетки перпендикулярен бесконечному набору равноотстоящих параллельных плоскостей, которые в совокупности содержат все точки прямой решетки. Поэтому координаты такого вектора в базисе (8.39) описывают и плоскости в реальном кристалле, соответствующие определенным «срезам» кристалла. Эти координаты называют *индексами Миллера*.

Перечислим теперь некоторые общие черты трехмерного закона дисперсии для электронов и фононов.

1. При приближении к границе зоны Бриллюэна перпендикулярная ей компонента групповой скорости электрона или фонона стремится к нулю.
2. Эффективная масса электрона и скорость звука могут быть анизотропными. Соответственно, анизотропными окажутся проводимость, магнитная восприимчивость и другие физические свойства кристалла.
3. Дно энергетической зоны для электрона может лежать ниже потолка предыдущей зоны, находясь в другой области q -пространства. В этом случае говорят о перекрытии зон.

§ 8.7. Эффект Мессбауэра

Пусть атомное ядро A с массой M может находиться в возбужденном состоянии с энергией ϵ и переходит в основное состояние, излучая фотон с энергией ϵ' (γ -радиоактивность). Для $A = Fe^{57}$ имеем

$$\epsilon = 14 \text{ КэВ} = 1,4 \cdot 10^4 \text{ эВ}, \quad Mc^2 \approx 53 \cdot 10^9 \text{ эВ}, \\ \text{собственная ширина линии } \Gamma \approx 5 \cdot 10^{-9} \text{ эВ}.$$

Обсудим зависимость поглощения фотонов от их энергии в (не очень толстом) образце, содержащем ядра A . Пока энергия фотонов заметно отличается от ϵ , основным механизмом уменьшения их потока является рассеяние на атомах вещества (с возможной ионизацией последних). Не очень толстые образцы вещества почти прозрачны для таких γ -квантов. Фотоны же с энергией ϵ должны сильно (резонансно) поглощаться в образце ядрами A , находившимися первоначально в невозбужденном состоянии, обеспечивая пик в коэффициенте поглощения (и затем переизлучаться, грубо говоря, изотропно).

Если расположить близко друг к другу два образца, I и II, содержащих указанные ядра A , то, на первый взгляд, фотоны, излученные ядрами в образце I, будут сильно поглощаться в образце II из-за резонансного поглощения ядрами A этого образца. Однако простое классическое рассмотрение заставляет ожидать, что все будет происходить по-другому, т. е. из-за отдачи энергия фотона $\epsilon' < \epsilon$.

◆ **Свободные ядра в газе.** Рассмотрим сначала покоящееся ядро. После излучения импульс отдачи ядра равен импульсу фотона $k = \epsilon'/c$, а энергия перехода ϵ есть сумма энергий фотона ϵ' и ядра $R = k^2/2M$:

$$\epsilon = \epsilon' + R; \quad R = k^2/2M = \epsilon'^2/(2Mc^2).$$

Поскольку $\epsilon \ll Mc^2$, то с хорошей точностью $R = \epsilon^2/(2Mc^2)$. Для Fe^{57} энергия отдачи $R \approx 2 \cdot 10^{-3} \text{ эВ} \gg \Gamma$. Такой же сдвиг энергии фотона получается за счет эффекта Доплера при скорости источника $v \approx 20 \text{ м/с}$.

Энергия ядра с первоначальным импульсом \mathbf{p} составляла $E_i = \mathbf{p}^2/2M$, его конечная энергия $E_f = (\mathbf{p} - \mathbf{k})^2/2M$, энергия фотона — E_γ . Баланс энергии: $E_i + \epsilon = E_f + E_\gamma$, т. е. $E_\gamma = \epsilon - R + \mathbf{k}\mathbf{p}/M = \epsilon - R + \mathbf{v}\mathbf{k}$.

Для газа это дает распределение числа фотонов по энергиям E_γ , которое получается сверткой этого выражения для E_γ с известной функцией распределения (Максвелла). Это кривая с максимумом вблизи $E_\gamma = \epsilon - R$, ширина этого максимума $\sim kT$. При $kT \leq 10^{-3} \text{ эВ}$ ($T < 10 \text{ К}$) ширина максимума меньше R , т. е. вероятность найти $E_\gamma = \epsilon$ мала, и пик в коэффициенте поглощения должен был бы исчезнуть.

Эта классическая картина сохраняется и при квантовом рассмотрении явления в газе.

♦ Для ядер в кристалле только квантовое рассмотрение имеет смысл. Обозначим через $|i\rangle$ вектор начального состояния ядра А в кристалле (до излучения) без учета ядерных степеней свободы. После излучения фотона с импульсом k (которое происходит мгновенно, с точки зрения атомных процессов) ядро переходит в состояние $\hat{T}_{-k}|i\rangle$, где $\hat{T}_{-k} = e^{ikx}$ — оператор конечного сдвига в импульсном пространстве, в точности подобный оператору конечного сдвига в x -пространстве (1.24). В силу соотношения неопределенностей, начальное состояние $|i\rangle$ не является состоянием с определенным значением импульса. Поэтому оно не ортогонально конечному состоянию $\hat{T}_{-k}|i\rangle$. Таким образом, имеется конечная вероятность того, что после излучения ядро не изменит своего квантового состояния, т. е. энергия излученного фотона будет в точности ϵ . При этом возможность резонансного поглощения в образце II сохраняется.

В простейшей модели ядро находится в осцилляторном потенциале с частотой ω :

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

Пусть $|i\rangle = |n\rangle$, т. е. $\hat{H}|i\rangle = \hbar\omega(n + 1/2)|i\rangle$. Конечное состояние получается из начального действием оператора \hat{T}_{-k} , т. е. $|f\rangle = \hat{T}_{-k}|i\rangle$. Возможные значения энергии фотона можно записать как $E_\gamma = \epsilon - \hbar\omega(n' - n)$, они образуют дискретный набор. Вероятность перехода $|n\rangle \rightarrow |n'\rangle$ записывается как $P_{nn'} = |\langle n'|\hat{T}_{-k}|n\rangle|^2$. В частности, ядро может остаться в том же состоянии, т. е. $E_\gamma = \epsilon$ (отдачи нет!):

$$P_{nn} = \left| \langle n|\hat{T}_{-k}|n\rangle \right|^2 = \left| \int dx |\psi_n(x)|^2 e^{ikx/\hbar} \right|^2 = \left| \int \rho_n(x) e^{ikx/\hbar} dx \right|^2 \equiv |F_n(k)|^2.$$

Введенная здесь величина $F_n(k)$ — фурье-образ плотности вероятности; ее называют **формфактором**. Если к тому же $\rho_n(x) = \rho_n(-x)$, то $F_n(k)$ действительна. При малых k

$$F_n(k) = \int \rho_n(x) \cdot (1 + ikx/\hbar - (1/2)(kx/\hbar)^2 + \dots) dx \approx 1 - (1/2)(k/\hbar)^2 \langle x^2 \rangle.$$

Если начальное состояние — основное, $n = 0$, то $|f\rangle$ — когерентное состояние (см. § 4.4) с $\alpha = -i\hbar k/\sqrt{2m\hbar\omega}$. Вероятность излучения без отдачи дается соотношением (4.37):

$$P_{00}(\omega) = e^{-k^2/2m\hbar\omega^2} \equiv e^{-R/\hbar\omega}.$$

Если частица участвует одновременно в двух колебательных движениях, с частотами ω_1 и ω_2 , то вероятность излучения без отдачи является произведением вероятностей для каждого из колебаний, $P = P_{00}(\omega_1)P_{00}(\omega_2)$. Точно так же для реального кристалла смещение ядра следует разложить по нормальным колебаниям решетки, плотность числа которых есть $\rho(\omega)$ (14.25в). В итоге вероятность излучения без отдачи оказывается произведением таких вероятностей для всех нормальных колебаний кристалла,

$$P_{00} = \exp\left(-R \int \frac{\rho(\omega)}{\hbar\omega} d\omega\right). \quad (8.40)$$

Правая часть этого соотношения называется *фактором Дебая–Валлера*. Он встречается и в других задачах физики твердого тела (ср. 4.26). Его изучение — хороший способ исследования свойств решетки в целом.

§ 8.8. Задачи

1. Докажите утверждения, приведенные после (8.17).
2. Используя условие нормировки на ячейке (8.6), найдите коэффициенты A и B волновой функции (8.16) для движения в периодическом потенциале (8.15). Вычислите плотность тока вероятности для движения в этом поле.
3. Найти энергию и волновую функцию состояния, локализованного вблизи «примеси» при $x = a$, моделируя ее заменой $-G\delta(x - a) \rightarrow -G_1\delta(x - a)$ в поле (8.15).
Ответ. $E = -mG_1^2/2\hbar^2$.
4. Найти энергию поверхностного уровня для задачи на полупрямой при $k_0a \gg 1$ ($0 < b < a$):

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < b, \\ -G \sum_{n=1}^{\infty} \delta(x - na) & \text{при } x > b. \end{cases}$$

Ответ. $E_T = -\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} (1 - 2e^{-2k_0 b})$.

5. Найти поток энергии волнового пакета атомных смещений, распространяющегося по простой линейной цепочке.
6. Построить собственные состояния для линейной цепочки с закрепленными концами.

Глава 9

СПИН

§ 9.1. Основные факты

Квантовая частица может иметь квантовые внутренние степени свободы, отсутствующие у классических частиц. Их квантовая природа означает, что эти величины исчезают в классическом пределе. Поэтому такие величины должны быть пропорциональны постоянной Планка \hbar .

Пример. У ядра есть собственный орбитальный момент L . В классическом случае $L = mvr$ стремится к нулю при $r \rightarrow 0$. В квантовой теории этот момент остается конечным и при исчезающе малых размерах ядра, поскольку единица квантования момента \hbar от размеров ядра не зависит.

Внутренние степени свободы не связаны с какими-либо пространственными координатами. В то же время полученный ранее вывод о том, что значения момента есть $\hbar\ell$ с целым ℓ , основывался на связи оператора момента с пространственными координатами. Если теперь **принять**, что эта внутренняя степень свободы подобна моменту импульса, т. е. описывается переменными с перестановочными соотношениями (6.2), то с учетом (6.12) переменная, отвечающая внутренней степени свободы и подобная квадрату момента, может принимать значения $\hbar^2\ell(\ell + 1)$ не только с целыми ℓ , но и с $\ell = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$ и соответствующими собственными значениями оператора $\ell_z = \ell, \ell - 1, \dots$

В опытах Штерна и Герлаха нейтральные атомы пролетали через неоднородное магнитное поле, где на атом действует сила $F = \mu_z \partial B_z / \partial z$, где μ — вектор собственного магнитного момента электрона, а $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ — магнитное поле. Если бы движение описывалось законами классической механики, то эта сила принимала бы любые значения в пределах $\pm \mu \partial B_z / \partial z$, что приводило бы к размытию на пластинке линии, вдоль которой осаждаются пролетевшие атомы. В соответствии с изложенным ниже, в разд. 10.1, квантованность значений μ_z приводит к появлению на пластинке $2\ell + 1$ полос. Для водорода и серебра на пластинке оказалось по две полосы, что формально соответствует $\ell = 1/2$. Такое нецелое значение ℓ невозможно связать с механическим моментом импульса, обсуждавшимся в гл. 6. Его можно связать только с внутренней степенью свободы электрона, похожей на момент. Ее

назвали спином.

■ В релятивистской квантовой теории трудно обойтись без понятия спина. В нерелятивистской квантовой механике постулируется, что **частицы могут иметь внутреннюю степень свободы, не связанную с пространственным движением и называемую спином. Оператор спина — вектор $\hat{S} \equiv \hbar\hat{s}$. Перестановочные соотношения для компонент этого вектора такие же, как и для компонент оператора момента импульса (6.2), т. е.**

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = ie_{ijk}\hat{s}_k; \quad [\hat{s}^2, \hat{s}_i] = 0. \quad (9.1)$$

Величина спина s (собственное значение оператора $\hat{s}^2 = s(s+1)$) — свойство данного сорта частиц.

Как и для момента импульса, собственные состояния спина можно классифицировать по значениям его проекции на какую-нибудь ось. Собственные значения операторов \hat{s}^2 и \hat{s}_z находят так же, как и для оператора момента (см. § 6.1). Отличие в том, что здесь нет представления \hat{s}_z в пространственных координатах (это внутренняя степень свободы!). Поэтому число s не обязано быть целым. В соответствии с (6.12) разрешено и $s = 1/2$. Результаты Штерна и Герлаха показывают, что именно такое значение реализуется для электрона. (Оно естественно получается в релятивистской теории.)

В природе реализуются частицы с разными значениями спина:

- спин 0 — α -частицы (ядра ${}_2\text{He}^4$), π - и K -мезоны, бозон Хиггса (*надеемся, что существует*);
- спин 1/2 — электроны, нейтрино, протоны, нейтроны, кварки, ${}_2\text{He}^3$;
- спин 1 — фотоны, W - и Z -бозоны (переносчики слабых взаимодействий), ρ -мезоны, дейтоны (ядра ${}_1\text{H}^2$);
- спин 3/2 — ядра Li^7 , Be^9 , Na^{21} ;
- спин 2 — гравитоны (*пока не обнаружены*), ядра Li^8 ;
- существуют ядра и с более высокими значениями спина.

§ 9.2. Частицы со спином 1/2. Спиноры

Далее говоря о спинорных частицах, мы будем иметь в виду частицы со спином 1/2 — электроны, протоны, нейтроны и т. п.

Поскольку значение s для электронов фиксировано, мы не будем указывать эту величину в обозначении собственных векторов $|s, s_z\rangle$. Собственные векторы $|s = \frac{1}{2}, s_z = \pm \frac{1}{2}\rangle$ мы будем обозначать просто $|\pm\rangle$.

Вектор состояния спинорной частицы можно представить в виде суперпозиции состояний с проекциями спина на ось z , равными $+1/2$ и $-1/2$, $\chi = a_{+(z)}|+\rangle + a_{-(z)}|-\rangle$, функции координат и времени $a_{\pm(z)}$ связаны соотношением нормировки $|a_{+(z)}|^2 + |a_{-(z)}|^2 = 1$. Это состояние записывают в виде столбца (его называют *спинором*), а сопряженный вектор состояния — в виде строки¹:

¹При таком выборе *ковариантной* записи спинора отвечает *контравариантная* запись сопряженного спинора, см. подробнее, например [1].

$$\chi \equiv |\rangle = \begin{pmatrix} a_{+(z)} \\ a_{-(z)} \end{pmatrix}, \quad \chi^+ \equiv \langle | (a_{+(z)}^*, a_{-(z)}^*). \quad (9.2)$$

Значок (z) напоминает о том, что рассматриваются проекции на ось z . Если записать тот же вектор состояния через состояния, отвечающие проекциям на ось x , то он, разумеется, имеет прежнюю форму (9.2), но с другими коэффициентами $a_{+(x)}$ и $a_{-(x)}$.

Набор матричных элементов $\langle sm | \hat{s}_i | sm' \rangle$, который получается из (6.14) и из определения \hat{s}_z , удобно представить в виде матриц¹, подобных (6.16):

$$\hat{s}_i \equiv \hat{\sigma}_i / 2 : \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (9.3)$$

Матрицы σ_i называют **матрицами Паули**. Легко проверить, что выполняются соотношения

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = I \cdot \delta_{ij} + i e_{ijk} \hat{\sigma}_k, \quad \hat{\sigma}_i^2 = I, \quad Tr I = 2, \quad Tr \hat{\sigma}_i = 0. \quad (9.4)$$

Если \mathbf{n} — единичный вектор, то скалярное произведение $(\sigma \mathbf{n})/2$ представляет собой оператор проекции спина на ось \mathbf{n} . Поэтому, в частности, $(\sigma \mathbf{n})^2 = 1$. Такое понимание величины $(\sigma \mathbf{n})$ легко позволяет получить также, что для любой функции $f(x)$ имеет место тождество

$$f(i a (\sigma \mathbf{n})) \equiv \frac{f(i a) + f(-i a)}{2} + (\sigma \mathbf{n}) \frac{f(i a) - f(-i a)}{2}. \quad (9.5)$$

Это соотношение нетрудно получить также, рассматривая функцию от оператора как ее разложение в ряд Маклорена (1.6) и применяя многократно первое равенство (9.4).

Набор матриц Паули реализует базис двумерного *фундаментального* представления группы трехмерных вращений $O(3)$ (она же — $SU(2)$).

Нередко спиновое и пространственное движения разделяются. При этом, вводя обобщенные координаты $q \equiv (r_i, s_z)$, можно записать

$$\psi(q) = \psi(\mathbf{r}) \cdot \chi(s_z). \quad (9.6)$$

9.2.1. Преобразование спиноров при вращении координат

Оператор поворота осей координат на конечный угол α относительно оси \mathbf{n} для произвольного значения момента импульса имеет вид $\hat{U}_n(\alpha) = e^{i\alpha(\mathbf{n}\hat{\mathbf{L}})/\hbar}$ (6.26). С учетом (9.3), (9.5) для преобразования спиноров это соотношение принимает вид

$$\hat{U}_n(\alpha) = e^{i(\mathbf{n}\sigma)\alpha/2} \equiv \cos \frac{\alpha}{2} + i(\mathbf{n}\sigma) \sin \frac{\alpha}{2}. \quad (9.7a)$$

Второе выражение получилось здесь посредством разложения первого в ряд с учетом того, что $\sigma_n^2 = 1$.

В частности, *при повороте на угол 2π вокруг любой оси компоненты спинора меняют знак.*

¹Подобные матрицы для спина 1 имеют вид (6.16).

Из (9.7а) легко получаются и явные выражения для операторов конечных вращений вокруг различных осей в случае, когда спиноры определены в базисе проекций на ось z :

$$\begin{aligned}\hat{U}_z(\alpha) &= \begin{pmatrix} e^{i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix}, \\ \hat{U}_x(\alpha) &= \begin{pmatrix} \cos \alpha/2 & i \sin \alpha/2 \\ i \sin \alpha/2 & \cos \alpha/2 \end{pmatrix}, \\ \hat{U}_y(\alpha) &= \begin{pmatrix} \cos \alpha/2 & \sin \alpha/2 \\ -\sin \alpha/2 & \cos \alpha/2 \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (9.7б)$$

С помощью этих выражений можно найти, например, выражения для собственных функций операторов проекций спина на оси x и y в базисе (9.3).

Изменение вида спинора $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ при повороте оси z на угол θ в плоскости xz описывается соотношением $\chi' = \hat{U}_y(\theta)\chi_+ = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{pmatrix}$. При этом среднее значение проекции спина на новую ось z дается естественным выражением

$$\langle s_{z'} \rangle = (1/2)\chi'^{\dagger} \sigma_z \chi' = (1/2) (\cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2)) = (1/2) \cos \theta.$$

Решения задач 9.1-12 являются необходимой составной частью излагаемой темы.

§ 9.3. Разложение по базису матриц Паули как технический прием

Разложение по базису матриц Паули — удобный способ работы при описании объектов с двумя возможными состояниями (спиновых систем, двухуровневых систем, двоичных элементов памяти и т. п.).

Так, любую 2×2 матрицу A можно представить в виде

$$A = a \cdot I + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}; \quad a = \frac{\text{Tr}A}{2}, \quad \mathbf{b} = \frac{\text{Tr}(A\boldsymbol{\sigma})}{2}. \quad (9.8)$$

• *Пример.* Рассмотрим изменение уровней системы с двумя вырожденными или близко расположенными уровнями ε_1 и ε_2 под действием возмущения \mathcal{V} с матричными элементами по этим состояниям V_{ij} ($i, j = 1, 2$) (разд. 5.2.4). Уровни энергии такой системы — собственные числа матрицы

$$\|\varepsilon + \mathcal{V}\| \equiv \begin{pmatrix} V_{11} + \varepsilon_1 & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} + \varepsilon_2 \end{pmatrix}.$$

Разложим эту матрицу по матрицам Паули (9.8), $\|\varepsilon + \mathcal{V}\| = a \cdot I + \sum_i b_i \cdot \sigma_i$. Уровни энергии — собственные значения этой матрицы. Унитарное преобразование, диагонализующее эту матрицу, приводит ее к форме $a \cdot I + b \cdot \sigma_3$ с собственными значениями $a \pm b$. Это преобразование отвечает вращению вектора \mathbf{b} , при этом

$$b = \sqrt{b_1^2 + b_2^2 + b_3^2} \quad (\text{ср. задачу 9.13}).$$

§ 9.4. Задачи

Ниже \mathbf{n} и \mathbf{k} — единичные векторы, $\mathbf{n}^2 = 1$, $\mathbf{k}^2 = 1$, $\sigma_{\mathbf{k}} \equiv \sigma_k$ — матрица Паули, отвечающая проекциям спина на ось \mathbf{k} .

1. Найти квадраты проекций электронного спина на оси x, y, z .
2. Получите соотношение (9.8).
3. Найти оператор проекции спина на ось \mathbf{n} — ср. (9.5).
4. Найти собственные функции и собственные значения операторов \hat{s}_x и \hat{s}_y в базисе (9.3).
5. В состоянии, где собственное значение \hat{s}_z есть $1/2$, найти вероятности того, что проекция спина на ось \mathbf{n} есть $+1/2$ и $-1/2$. Найти $|\chi_x\rangle$, для которой $s_x|\chi_x\rangle = \pm|\chi_x\rangle/2$ и $|\chi_y\rangle$, для которой $s_y|\chi_y\rangle = \pm|\chi_y\rangle/2$.
6. Пусть $\chi = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ e^{i\beta} \sin \alpha \end{pmatrix}$. Найти такую ось z' , чтобы было $s_{z'}\chi = (1/2)\chi$.
Указание. Вычислить сначала $(\chi^\dagger \sigma_i \chi)$.
7. Пусть $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d}$ — спинорные векторы, т. е. тройки 2×2 матриц с равным нулю следом и таких, что например $c_i^T c_i = 1$. Докажите, что имеет место правило Фирца $(\mathbf{a}\mathbf{b})(\mathbf{c}\mathbf{d}) = (\mathbf{a}\mathbf{c})(\mathbf{b}\mathbf{d}) - (\mathbf{a}\mathbf{d})(\mathbf{c}\mathbf{b})$.
8. Найти $(\sigma\mathbf{a})(\sigma\mathbf{b})$; $(\sigma\mathbf{a})^n$; $e^{i(\sigma\mathbf{n})\alpha}$ (ср. (9.5)).
9. Покажите, что величина $\chi_1^\dagger \chi_2 \equiv a_1^* a_2 + b_1^* b_2$ не изменяется при вращении координат (9.7), т. е. является скаляром.
10. Для каждой из матриц Паули найти ее преобразование при вращении системы координат (9.7) на угол θ относительно осей x, y и z .
11. В общем случае получить преобразование матриц Паули $\sigma_{\mathbf{k}}$ при вращении системы координат (9.7), т. е. вычислить $\hat{U}^{-1} \sigma_{\mathbf{k}} \hat{U}$.
12. Докажите, что $P_+ = (1 + \sigma\mathbf{n})/2$ — проекционный оператор. Найти собственный вектор этого оператора (состояния, на которое осуществляется проектирование).
13. Найти собственные значения операторов $a + b \mathbf{n}\sigma$, $f(a + b \mathbf{n}\sigma)$.
14. Уровни энергии частицы 0 и E (остальные уровни расположены далеко). Как сдвинутся эти уровни под действием возмущения, оператор которого для этих состояний можно записать в виде матрицы: $V = a\sigma_y + b\sigma_x$. Рассмотрите переход к случаю с вырождением, $E = 0$.

Глава 10

ДВИЖЕНИЕ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Квантовое описание движения частицы в магнитном поле не сводится к простому переводу на квантовый язык классических величин. Здесь существенную роль играет спин частицы — объект, исчезающий в классическом пределе.

§ 10.1. Магнитный момент частицы

Обсудим сначала задачу с точки зрения принципа соответствия.

В классической теории магнитный дипольный момент атома (далее — просто *магнитный момент*) обусловлен движением электронов

$$\boldsymbol{\mu} = \sum_a e_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a / 2c = (e/2mc) \cdot \mathbf{L},$$

где L — момент импульса системы электронов. Величину $e/2mc$ называют *гиромагнитным отношением*.

Взаимодействие нейтрального атома с магнитным полем \mathbf{B} описывается добавкой $V = -(\boldsymbol{\mu}\mathbf{B})$ к энергии (функции Гамильтона). В неоднородном магнитном поле на такой атом действует сила, равная $-\nabla V$.

По принципу соответствия, в квантовой механике гамильтониан взаимодействия заряженной частицы с внешним магнитным полем имеет вид

$$\hat{H}_M = -(\hat{\boldsymbol{\mu}}\mathbf{B}), \quad (10.1)$$

где для частицы без спина (орбитальный) магнитный момент есть

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = (e/2mc) \hat{\mathbf{L}} \equiv -\mu_B \hat{\boldsymbol{\ell}} \quad \text{и} \quad \mu_B = e\hbar/2mc. \quad (10.2)$$

Здесь учтено, что $\hat{\mathbf{L}} = \hbar \hat{\boldsymbol{\ell}}$ и введена величина μ_B , которую называют *магнетон Бора*. В соответствии с этим проекция магнитного момента частицы на ось z , $\mu_z = \mu_B \ell_z$, принимает дискретный ряд значений $-\mu_B \ell$, $-\mu_B(\ell - 1)$, ..., $\mu_B \ell$.

Наличие спина приводит к существованию дополнительного (спинового) магнитного момента, который сходным образом связан со спином. Для частицы сорта i (электрона, протона и т. п.):

$$\hat{\mu}_s = g_i \mu_B^i \hat{\mathbf{S}}. \quad (10.3)$$

Здесь $\mu_B^i \equiv e\hbar/2m_i c$ — магнетон Бора для частицы i , можно сказать, что этот множитель определяется из соображений размерности. Таким образом, полный оператор магнитного момента принимает вид

$$\hat{\mu} = \mu_B (\hat{\ell} + g \hat{\mathbf{S}}). \quad (10.4)$$

Поскольку спиновая степень свободы не имеет классического аналога, то в рамках квантовой механики никаких ограничений на число g_i нет, и в нерелятивистском описании это число берется из опыта. Оно определяется в релятивистской квантовой теории с учетом всех взаимодействий, в которых может принимать участие данная частица. Для точечных заряженных частиц со спином $1/2$ должно быть $g_i = 2$, а для точечных нейтральных частиц $g_i = 0$. Отличие от этих значений сигнализирует о наличии внутренней структуры частицы. Для электрона e эффекты внутренней структуры невелики, и g_e лишь немного отличается от 2. Для протона p и нейтрона n эти эффекты очень велики так, что¹:

$$g_e/2 = 1,001159625, \quad g_p/2 = 2,79, \quad g_n/2 = -1,91. \quad (10.5)$$

Обратите внимание на сравнительно большой спиновый магнитный момент нейтральной частицы — нейтрона.

Далее, говоря об электроне, мы всегда будем говорить просто о магнетоне Бора (не напоминая эпитет «электронный») и почти всегда будем считать $g = 2$.

§ 10.2. Уравнение Шредингера

Для частицы в электромагнитном поле импульс связан со скоростью соотношением $\mathbf{p} = m\mathbf{v} + e\mathbf{A}/c$, где \mathbf{A} — вектор-потенциал электромагнитного поля, из которого электрическое \mathcal{E} и магнитное \mathbf{B} поля выражаются соотношениями $\mathbf{B} = [\nabla \times \mathbf{A}]$, $\mathcal{E} = -(1/c)\partial\mathbf{A}/\partial t - \nabla\phi$. Поэтому классическая функция Гамильтона в присутствии магнитного и электрического полей имеет вид $H = (\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c)^2/2m + e\phi(r)$. Соответственно, гамильтониан электрона в электромагнитном поле с учетом спинового магнитного момента имеет вид (получен в 1927 г. В. Паули):

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)^2}{2m} + e\phi(r) - g\mu_B(\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B}). \quad (10.6)$$

Воспользовавшись уравнениями движения для операторов (гл. 3), можно проверить, что из этого гамильтониана получаются классические по форме выражения

¹Дело в том, что электрон участвует лишь в электромагнитном взаимодействии, интенсивность которого определяется постоянной тонкой структуры, которая мала, $\alpha = e^2/(\hbar c) = 1/137$, а протоны и нейтроны участвуют в сильном (ядерном) взаимодействии, для которого соответствующая константа — порядка 1.

для скорости частицы и ее ускорения

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{1}{m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right), \quad m \frac{d\hat{\mathbf{v}}}{dt} = e \left(\frac{[\hat{\mathbf{v}} \times \mathbf{B}]}{c} + \mathbf{E} \right) + g\mu_B \nabla(\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{B}). \quad (10.7a)$$

Получившиеся компоненты скорости уже не коммутируют друг с другом. Прямое вычисление коммутатора дает, например,

$$[v_x, v_y] = -\frac{i\hbar e}{m^2 c} B_z. \quad (10.7b)$$

Выражение для плотности тока вероятности в присутствии магнитного поля модифицируется. Оно получается по той же схеме, как и в разд. 2.1.3, и имеет вид

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^\dagger (\nabla\psi) - (\nabla\psi^\dagger)\psi] - \frac{e}{mc} \mathbf{A}\psi^*\psi + \frac{\mu c}{es} [\nabla \times (\psi^\dagger \hat{\mathbf{s}}\psi)]. \quad (10.8)$$

10.2.1. Переход к магнитному моменту

Рассмотрим движение частицы в однородном магнитном поле B и выберем вектор-потенциал в виде $\mathbf{A} = -[\mathbf{r} \times \mathbf{B}]/2$. Тогда, раскрывая скобки, запишем

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + e\phi(\mathbf{r}) - g\mu_B \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{B} + \frac{e}{2mc} \mathbf{p}[\mathbf{r} \times \mathbf{B}] + \frac{e^2[\mathbf{r} \times \mathbf{B}]^2}{8mc^2}.$$

Учитывая, что $[\mathbf{r} \times \mathbf{p}] = \mathbf{L} \equiv \hbar \ell$, получаем отсюда (ср. (10.2))

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_M + \hat{H}_2, \quad (10.9)$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + e\phi(\mathbf{r}), \quad \hat{H}_M = -\mu_B(\hat{\ell} + g\hat{\mathbf{s}}) \cdot \mathbf{B}, \quad \hat{H}_2 = \frac{e^2[\mathbf{r} \times \mathbf{B}]^2}{8mc^2}.$$

Слагаемое \hat{H}_M в точности соответствует введенному ранее постулативно гамильтониану (10.1) с магнитным моментом (10.4).

□ Слагаемым \hat{H}_2 можно пренебречь, если движение частицы ограничено небольшой областью атомных размеров. Размер этой области $\langle a \rangle$ определяется решением задачи при $B = 0$, т. е. для гамильтониана \hat{H}_0 (напомним, что $e < 0$). В атомной системе средняя потенциальная энергия (с точностью до коэффициента 2 и до знака) — того же порядка, что и полная энергия состояния E_n и что средняя кинетическая энергия. Для грубой оценки примем $\langle p^2 \rangle \sim 2m|E_n|$ и $\ell \sim 1$. В силу соотношения неопределенностей $\langle a \rangle^2 \sim \hbar^2/(2m|E_n|)$. Поэтому среднее значение \hat{H}_2 можно оценить как $\langle H_2 \rangle \sim \frac{e^2 \hbar^2 B^2}{2m|E_n| 8mc^2} \sim \left| \frac{(\mu_B B)^2}{E_n} \right|$. Итак, линейное по полю слагаемое \hat{H}_M можно рассматривать как малую поправку к основному взаимодействию, формирующему атомные уровни энергии, и одновременно можно пренебрегать слагаемым \hat{H}_2 по сравнению с \hat{H}_M при

$$\frac{\langle \hat{H}_M \rangle}{\langle \hat{H}_0 \rangle} \sim \frac{\langle \hat{H}_2 \rangle}{\langle \hat{H}_M \rangle} \sim \frac{(\mu_B B)^2}{|E_n|} \equiv \delta_B \ll 1. \quad (10.10)$$

(Заметим, что для применимости теории возмущений необходимо куда более сильное условие $\mu_B B \ll |E_n - E_m|$ для любой пары термов гамильтониана \hat{H}_0 .)

В зависимости от свойств рассматриваемых состояний гамильтониана \hat{H}_0 может оказаться, что $\langle \hat{H}_M \rangle = 0$. В этом случае в первом исчезающем приближении теории возмущений поправка к энергии, обусловленная магнитным полем, квадратична по полю. В принципе, она состоит из двух слагаемых — поправка второго порядка по возмущению $\hat{H}_M = 0$, которую мы обозначим ΔE_{M2} , и поправка первого порядка по возмущению \hat{H}_2 , которую мы обозначим ΔE_2 . Для последней величины справедлива оценка (10.10), а для первой величины мы используем стандартную оценку теории возмущений. В итоге (ниже E_m — уровень, ближайший к рассматриваемому уровню E_n)

$$|\Delta E_{M2}| \sim \frac{(\mu_B B)^2}{|E_n - E_m|} \gtrsim |\Delta E_2| \sim \frac{(\mu_B B)^2}{E_n}. \quad (10.11)$$

Иными словами, в условиях (10.10) слагаемым \hat{H}_2 чаще всего можно пренебречь по сравнению с \hat{H}_M даже если поправка первого порядка по полю исчезает в силу каких-нибудь свойств симметрии системы.

▽ Если величина δ_B не является малой (как например, для очень сильных полей или для состояний атома водорода с большим n — ридберговских атомов), то использование понятия магнитного момента без учета квадратичного по полю слагаемого в гамильтониане может привести к ошибкам.

10.2.2. Электрон в однородном магнитном поле

Для движения свободного электрона в однородном магнитном поле (при $\phi = 0$) характерные смещения не малы, слагаемое \hat{H}_2 (10.9) становится определяюще важным, гамильтониан не сводится к простому выражению (10.1). Для определенности мы направим ось z вдоль направления поля.

Прежде чем решать уравнение, напомним, что в классической задаче движение электрона складывается из свободного движения вдоль оси z и вращения с частотой (*Ларморовская частота*)

$$\omega_B = eB/mc \quad (10.12)$$

в плоскости (x, y) по окружности радиуса $\rho = v_{\perp}/\omega_B$. Координаты центра окружности выражаются через координату частицы и ее скорость соотношениями $x_c = x + v_y/\omega_B$, $y_c = y - v_x/\omega_B$.

Для квантовой задачи естественно ввести операторы координат центра окружности и квадрата ее радиуса (ср. (10.7))

$$\hat{x}_c = \hat{x} + \hat{v}_y/\omega_B, \quad \hat{y}_c = \hat{y} - \hat{v}_x/\omega_B, \quad \hat{\rho}^2 = (\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2)/\omega_B^2. \quad (10.13)$$

Можно проверить, что все эти операторы сохраняются. В то же время операторы \hat{x}_c и \hat{y}_c не коммутируют друг с другом. Это означает (см. § 2.2), что состояния поперечного движения вырождены. На классическом языке это — вырождение по положениям центра окружности.

• Чтобы решить уравнение Шредингера, запишем векторный потенциал в виде $\mathbf{A} = (0, xB, 0)$. Тогда

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{(\hat{p}_y - exB/c)^2}{2m} + \mu_B \sigma_z B.$$

Видно, что $[\hat{H}, \hat{p}_z] = [\hat{H}, \hat{p}_y] = [\hat{H}, \hat{s}_z] = 0$, т. е. p_z , p_y и s_z сохраняются.

Ищем теперь ψ в виде $\exp[i(y p_y + z p_z)/\hbar] \phi(x) \chi(s_z)$. Тогда в гамильтониане уравнения Шредингера для функции $\phi(x)$ операторы \hat{p}_z , \hat{p}_y и s_z заменяются на числа p_z , p_y и $\sigma_z/2 = +1/2$ и $-1/2$, т. е. это уравнение принимает вид:

$$\frac{\hat{p}_x^2}{2m} \phi(x) + \frac{m\omega_B^2 (x - x_0)^2}{2} \phi(x) = (E - \mu_B \sigma_z B - \frac{p_z^2}{2m}) \phi(x) \quad \left(x_0 = \frac{c p_y}{eB}\right).$$

Полученное уравнение по форме совпадает с уравнением Шредингера для осциллятора с частотой ω_B (с положением минимума потенциала $x = x_0$). Поэтому энергии уровней¹ и волновые функции выражаются через решения задачи об осцилляторе $\psi_n(x/x_0)$ (4.20):

$$E = \hbar\omega_B \left(n + \frac{1}{2} + \sigma_z\right) + \frac{p_z^2}{2m} \quad (\sigma_z = \pm 1), \quad (10.14)$$

$$\psi_{B,y} = e^{i(p_y y + p_z z)/\hbar} \psi_n \left(\frac{x - c p_y/eB}{x_{0B}}\right), \quad x_{0B} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_B}}. \quad (10.15a)$$

Значок y в индексе функции отмечает выбор калибровки вектора-потенциала (вдоль оси y). Обратите внимание, что значение импульса p_y в выражение для энергии не входит.

◊ Найденные решения совсем не похожи на классические. Это видимое несоответствие классике разрешается, если вспомнить, что наши состояния (10.15a) бесконечнократно вырождены по p_y даже при фиксированном продольном импульсе p_z . При переходе к другой форме (калибровке) векторного потенциала получаются те же собственные значения энергии, но с другим набором собственных функций, которые можно представить как суперпозиции выписанных выше (это разные базисы Гильбертова подпространства, отвечающего заданным значениям энергии и p_z). В частности, если выбрать векторный потенциал в виде $\mathbf{A} = (-yB, 0, 0)$, то решение проводится точно так же, как и выше — с очевидными заменами переменных. Получаются те же уровни энергии (10.14), а волновые функции имеют похожий, но в сущности совсем другой вид

$$\psi_{B,x} = e^{i(p_x x + p_z z)/\hbar} \psi_n \left(\frac{y + c p_x/eB}{x_{0B}}\right), \quad (10.15b)$$

и состояния вырождены уже по величине p_x .

¹ Эти уровни энергии были найдены В.А. Фоком и Д.Дарвиним в 1928 г. и переоткрыты Л.Д. Ландау в 1932 г. В литературе их называют уровнями Ландау.

• Полученные состояния бесконечнократно вырождены по p_y даже при фиксированном продольном импульсе p_z . Однако, кратность вырождения становится конечной для движения, ограниченного конечной площадью $S = XY$. Ограничение возникает из требования, чтобы центр орбиты помещался в этой площадке.

Напомним, что операторы координат центра орбиты \hat{x}_c, \hat{y}_c (10.13) по отдельности сохраняются (но не одновременно — они не коммутируют друг с другом). Если оба размера велики по сравнению с радиусом орбиты, можно использовать квазиклассические оценки. В соответствии с (5.25), число различных значений p_y в интервале Δp_y равно $\Delta p_y Y / (2\pi\hbar)$. Из условия, что центр орбиты (10.13) лежит внутри нашей области, $0 < x_0 < X$, получается $\Delta p_y = eBX/c$. В итоге при заданных n и p_z кратность вырождения (число состояний) выражается через магнитный поток $\Phi = BS$:

$$g_E = eBS / (2\pi\hbar c) \equiv \Phi / \Phi_0, \quad \text{где } \Phi_0 = 2\pi\hbar c / e. \quad (10.16)$$

Здесь появилась величина Φ_0 — квант магнитного потока. Это понятие не используется в этом учебнике, но оно используется в некоторых задачах физики твердого тела.

• Приведем для полноты еще одно решение задачи о движении электрона в однородном магнитном поле. Рассматриваемое решение позволяет естественно добавить силы, обладающие цилиндрической симметрией (см. задачу 10.11). В этом решении мы используем еще один выбор векторного потенциала — в виде $\mathbf{A} = -[\mathbf{B} \times \mathbf{r}] / 2$. При этом удобно решать задачу в цилиндрических координатах (ρ, ϕ, z) . В этих координатах $\mathbf{A} = (A_\rho, A_\phi, A_z) \equiv (0, B\rho/2, 0)$. При этом можно выполнить разделение переменных $\psi = e^{im\phi + ip_z z / \hbar} R(\rho) / \sqrt{2\pi}$, и уравнение Шредингера для функции $R(\rho)$ принимает вид (ниже мы обозначаем массу электрона через M и не выписываем спиновый вклад)

$$R'' + \frac{1}{\rho} R' - \frac{m^2}{\rho^2} R + \left[\frac{2ME - p_z^2}{\hbar^2} - \frac{mM\omega_B}{\hbar} - \left(\frac{M\omega_B}{2\hbar} \rho \right)^2 \right] R = 0.$$

Обозначив $\beta = (E - p_z^2/2M) / (\hbar\omega_B) - m/2$ и введя переменную $\xi = (M\omega_B\rho / (2\hbar))^2$, перепишем это уравнение в виде

$$\xi R'' + R' + [-\xi/4 + \beta - m^2/(4\xi)] R = 0.$$

Нетрудно установить, что $R \rightarrow e^{-\xi/2}$ при $\xi \rightarrow \infty$, а при $\xi \rightarrow 0$ получается $R \rightarrow \xi^{|m|/2}$. Поэтому удобно искать решение в виде $R(\xi) = e^{-\xi/2} \xi^{|m|/2} \omega(\xi)$. Для функции $\omega(\xi)$ получается уравнение, которое решается с помощью разложения в ряд по той схеме, которая была использована в § 7.3 для атома водорода. При произвольном значении β волновая функция растет при $\xi \rightarrow \infty$ как $e^{\xi/2}$. Чтобы получить нормируемое решение с убывающей при $\xi \rightarrow \infty$ асимптотикой, надо наложить условие $\beta - (|m| + 1)/2 = n_\rho \geq 0$ — целое. При этом уровни энергии даются формулой (ср. (10.14))

$$E = \hbar\omega_B \left(n_\rho + \frac{|m| + m + 1}{2} + \sigma_z \right) + \frac{p_z^2}{2M}. \quad (10.17)$$

Здесь обсуждавшееся выше вырождение выглядит как независимость энергии от m при $m < 0$ или как независимость от m при фиксированной величине $n_\rho + m$ и при $m > 0$.

Разумеется, эти волновые функции и волновые функции каждого из наборов (10.15) можно выразить в виде суперпозиции функций каждого из других наборов.

§ 10.3. Движение спина в магнитном поле

Уравнение движения спина электрона в магнитном поле (с учетом перестановочных соотношений (9.1)) имеет вид

$$i\hbar \frac{d\mathbf{s}}{dt} = [\mathbf{s}, \hat{H}] \equiv -i[\mu_s \times \mathbf{B}] = -i(g_e/2)\mu_B[\mathbf{s} \times \mathbf{B}]. \quad (10.18)$$

Согласно этому уравнению, спин прецессирует вокруг направления магнитного поля, т. е. компонента спина, направленная вдоль поля, неизменна, а поперечная компонента вращается с угловой скоростью $\omega = (g_e/2)(\mu_B/\hbar)\mathbf{B} = (g_e/2)(e\mathbf{B}/mc)$.

Это явление можно описать и по-другому. Для этого рассмотрим поле, направленное по оси z и спин, первоначально направленный по оси x . В базисе проекций на ось z спиновая волновая функция в первый момент имеет вид $\chi(t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Энергии, отвечающие проекциям спина на поле, равным $+1/2$ и $-1/2$, различны, это $E_{\pm} = \mp(g_e/2)\mu_B B$. В соответствии с уравнением Шредингера, зависящим от времени, каждая из этих компонент меняется со временем по разному,

$$\chi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-iE_+t/\hbar} \\ e^{-iE_-t/\hbar} \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i(g_e/2)\mu_B t/\hbar} \\ e^{-i(g_e/2)\mu_B t/\hbar} \end{pmatrix}$$

В соответствии с решением задачи 9.6, это и означает, что направление спина меняется по закону (ϕ – азимутальный угол)

$$\phi = t(E_- - E_+)/\hbar \equiv (g_e/2)\mu_B B t/\hbar = (g_e/2)(eB/mc)t,$$

т. е. спин вращается с угловой скоростью $(g_e/2)(eB/mc)$.

◇ Уравнение для скорости электрона в однородном магнитном поле $d\mathbf{v}/dt = (e/mc)\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ выглядит точно так же как (10.18). Соответственно вектор скорости прецессирует вокруг направления поля \mathbf{B} с циклотронной частотой eB/mc (10.14). Поскольку g_e очень близко к 2, но все же не равен 2, проекция спина на направление \mathbf{v} меняется со временем, хотя и очень медленно. Если в начале спин был параллелен импульсу, то после одного оборота их направления станут немного различаться, и совпадут только через $N \approx 1/(g_e - 2) \approx 860$ оборотов. Этот эффект позволяет управлять ориентацией спина электрона в ускорителе. С другой стороны, если измерить точный момент времени, когда параллельность восстановится, например, через 10^{10} оборотов, то можно измерить величину $(g_e - 2)/2$ с точностью около 10^{-10} (для кольца длиной 3 м при энергии электронов больше 10 МэВ это потребует всего лишь 100 секунд).

• Если магнитное поле зависит от координат, то даже для нейтральной частицы импульс начинает зависеть от координаты. Вычисляя по общим правилам $d\mathbf{p}/dt = [\mathbf{p}, \hat{H}]/i\hbar$ с учетом (9.1) получаем хорошо известное в электродинамике соотношение

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla\{g\mu_B(\mathbf{sB})\}. \quad (10.19)$$

• Если движение квазиклассично, усреднение уравнения движения для спина по волновому пакету дает для средних значений $d\mathbf{s}/dt = (ge/2mc)\mathbf{s} \times \mathbf{B}$. Поскольку намагниченность вещества M определяется спинами его электронов, то отсюда следует уравнение Ландау-Лифшица для намагниченности (отличим g от 2 пренебрегаем):

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \frac{e}{mc}[\mathbf{M} \times \mathbf{B}] \equiv [\omega_B \times \mathbf{M}].$$

§ 10.4. Калибровочная инвариантность

Из курса электродинамики известно, что вектор-потенциал определяется через измеримую величину — напряженность поля только с точностью до градиента произвольной функции (*калибровочная, или градиентная, инвариантность* уравнений электродинамики). Таким образом, и импульс не определяется однозначно значениями скоростей и полей. Эта неоднозначность обобщает известную неоднозначность в определении энергии — с точностью до выбора начала отсчета.

• Идея калибровочной инвариантности следующим образом распространяется на описание квантовой системы заряженных частиц, взаимодействующих с электромагнитным полем.

Нетрудно проверить, что уравнение Шредингера для частицы с зарядом e не меняет свою форму при одновременном преобразовании полей и волновой функции с помощью произвольной функции координат и времени $f(\mathbf{r}, t)$:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A} + \nabla f(\mathbf{r}, t), & \phi(\mathbf{r}) &\rightarrow \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \\ \psi &\rightarrow \psi \cdot e^{ie f(\mathbf{r}, t)/\hbar c}. \end{aligned} \quad (10.20)$$

(Для четырехмерного вектора-потенциала $A^\mu = (\phi, \mathbf{A})$ преобразование (10.20) имеет вид $A^\mu \rightarrow A^\mu - \partial f / \partial x_\mu$.)

Такое преобразование называют *калибровочным*. Независимость наблюдаемых физических результатов теории от калибровочного преобразования называют *калибровочной (gauge) инвариантностью*. Формально она проявляется в инвариантности уравнения Шредингера относительно этих преобразований.

Калибровочная инвариантность позволяет накладывать на вектор-потенциал дополнительные (*калибровочные*) условия, делающие более удобными те или иные вычисления. В частности, во многих задачах удобно использовать релятивистски инвариантное **условие Лоренца (калибровку Лоренца)** $\partial_\mu A^\mu = 0$. В других задачах удобно использовать условия, которые не являются релятивистски инвариантными, поскольку содержат в себе какой-то избранный вектор n^α . Пример такого типа дает используемая нами в §12.3 **кулоновская калибровка**, в которой выделенную роль играет ось времени:

$$\phi = 0, \quad \text{div} \mathbf{A} = 0. \quad (10.21)$$

Можно стартовать и с инвариантности вероятностей относительно изменения фазы волновой функции (одинаковой во всем пространстве и не зависящей от времени). Естественное обобщение этого — возможная инвариантность относительно

фазы, меняющейся в пространстве и времени $\psi \rightarrow \psi e^{i\alpha(\mathbf{r})}$. Чтобы такая инвариантность имела место, изменения в величине $\hat{p}^2 \psi e^{i\alpha(\mathbf{r})}$ должны быть скомпенсированы изменениями в слагаемых, отвечающих взаимодействию. Электромагнитное поле с выписанными преобразованиями (при $\alpha(\mathbf{r}) = e f(\mathbf{r})$) как раз и компенсирует эти изменения. Поэтому электромагнитное поле можно рассматривать как компенсирующее поле по отношению к нашим преобразованиям. Если бы мы не знали заранее о его существовании, мы предположили бы, что такое компенсирующее поле должно быть в Природе.

Подобная идея для калибровочных преобразований более общего вида была выдвинута в 1954 г. Янгом и Миллсом. Она составила основу современного описания взаимодействий элементарных частиц, состоящего из единой теории электромагнитных и слабых взаимодействий и квантовой хромодинамики. В теории электрослабых взаимодействий частицы компенсирующих — калибровочных — полей — это фотон и его аналоги — W - и Z -бозоны со спином 1 и с массами в 85–100 раз больше массы протона. Они обнаружены в 1970-х гг. В теории сильного взаимодействия — квантовой хромодинамике — частицы калибровочного (компенсирующего) поля называются глюонами, они не могут улетать далеко от своих источников.

§ 10.5. Задачи

1. Найти относительные интенсивности расщепленных пучков нейтронов в опыте Штерна-Герлаха, если поляризованные вдоль оси x нейтроны движутся вдоль оси z , а магнитное поле направлено в плоскости xy под углом 45° к оси x .
2. Электроны, поляризованные вдоль оси z , движутся вдоль этой оси. Они проходят последовательно фильтры, пропускающие частицы, поляризованные вдоль оси x (вверх), и под углом θ к оси x — в плоскости xy . Найти долю прошедших частиц.
3. Пучок нейтронов движется по оси x и попадает при $x = 0$ в область однородного магнитного поля, направленного по оси z . Найти коэффициент отражения для нейтронов, поляризованных по оси z вверх или вниз. Найти вероятность переверота спина при отражении для нейтронов, поляризованных по оси x .
4. Пучок нейтронов (спин $1/2$), поляризованных вдоль оси x , влетает в однородное магнитное поле, направленное вдоль оси z . Найти средние значения $\langle s_x \rangle$ и $\langle s_x^2 \rangle$. Считать размер области изменения поля малым.
5. По оси x со скоростью v движется пучок нейтронов, поляризованных вдоль этой оси. Найти доли нейтронов, проходящих через фильтры в двух случаях:
 - а) Он проходит последовательно фильтры, пропускающие нейтроны, поляризованные вдоль оси z , и под углом θ .
 - б) Он проходит область длиной L с однородным магнитным полем B , направленным по оси z . После этого пучок проходит через фильтр, пропускающий лишь нейтроны, поляризованные под углом θ к оси x в плоскости xz .
6. Докажите (10.7).
7. Найти операторы скорости \hat{v} и ускорения \hat{a} нейтральной частицы (например, нейтрона), находящейся в магнитном поле.
8. Проверьте, что операторы координат центра орбиты \hat{x}_c и \hat{y}_c (10.13) сохраняются.

Вычислить коммутатор $[\hat{x}_c, \hat{y}_c]$.

9. Получите выражение для плотности тока вероятности электрона в магнитном поле (10.8). Убедитесь в калибровочной инвариантности этого выражения.
10. Выразить волновую функцию (10.15б) через волновые функции (10.15а).
11. Найти уровни энергии электрона в однородном магнитном поле \mathbf{B} , направленном по оси z и находящегося под воздействием осцилляторной силы с потенциалом $U = m\omega^2(x^2 + y^2)/2$. (При решении именно этой задачи В.А. Фок в 1928г. впервые получил в частности решения (10.14).)
12. Показать, что
$$\left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c}\right)^2 - 2m\frac{e\hbar}{2mc}\sigma\mathbf{B} = \left(\sigma\left(\mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c}\right)\right)^2.$$
13. 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} .
14. Обобщить результат предыдущей задачи на случай однородного непостоянного магнитного поля, направление которого остается неизменным, т. е. $\mathbf{B}(t) = B(t)\mathbf{n}_0$.
15. Частица со спином $s = 1/2$ и магнитным моментом μ находится в магнитном поле $\mathbf{B}(t)$ вида $\mathbf{B} = (B_0 \cos \omega_0 t, B_0 \sin \omega_0 t, B_1)$, 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 $B_1 \ll B_0$; обратить внимание на резонансный характер зависимости вероятности "переворота" от частоты ω_0 в этом случае.

Указание. Перейти во вращающуюся систему отсчета.

Глава 11

СЛОЖЕНИЕ МОМЕНТОВ

Начиная с этой главы, и орбитальный момент ℓ и спин s обозначаются одной и той же буквой j . Для соответствующих операторов \hat{j}_i справедливы перестановочные соотношения (6.2), но связь с координатами типа (6.19), вообще говоря, отсутствует. Для определенности будем считать $j_1 \geq j_2$.

§ 11.1. Сложение моментов

◇ Рассмотрим систему электронов в атоме как пример системы, для которой должна быть решена задача сложения моментов. Эта система в целом обладает сферической симметрией, и полный момент импульса системы сохраняется. В первом приближении каждый электрон движется в центрально-симметричном самоогласованном поле ядра и остальных электронов, определены моменты каждого электрона. При учете различия взаимодействия между электронами от взаимодействия с их усредненным распределением, эта сферическая симметрия для отдельных электронов нарушается, т. е. моменты отдельных электронов не сохраняются, но сохраняется суммарный момент всех электронов. Однако, пока это взаимодействие между электронами остается слабым, «память» о моментах отдельных электронов должна сохраняться в полном описании.

◆ Итак, пусть рассматриваемую сферически симметричную систему можно разбить на две подсистемы; каждая из которых сама по себе обладает сферической симметрией, а их взаимодействие нарушает эти частные симметрии. Сферические симметрии подсистем означают, в частности, что их состояния удобно описывать с помощью моментов импульса подсистем j_1 и j_2 . Взаимодействие часто зависит от относительной ориентации этих моментов так, что соответствующее возмущение можно записать в виде $\hat{V} = 2A(\mathbf{j}_1\mathbf{j}_2)$.

Действуя по теории возмущений, нужно найти собственные значения оператора \hat{V} и построить его собственные состояния из собственных состояний подсистем. Для этого перепишем оператор V через оператор суммарного момента импульса системы \mathbf{j} :

$$\hat{V} = A (\hat{\mathbf{j}}^2 - \hat{\mathbf{j}}_1^2 - \hat{\mathbf{j}}_2^2), \quad (\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2). \quad (11.1)$$

Из перестановочных соотношений (6.2), (6.5) для операторов \hat{j}_{1i} и \hat{j}_{2i} получают-ся точно такие же соотношения для суммарного момента \hat{j}_i . Поэтому все выводы, следующие из алгебры операторов, справедливы и в этом случае. В частности, собственные значения оператора \hat{j}^2 определяются так же, как в гл. 6, и собственные значения оператора (11.1) имеют вид $A[j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)]$.

Итак необходимо по известным исходным состояниям $|j_1, m_1\rangle, |j_2, m_2\rangle$ построить собственные состояния оператора полного момента и найти возможные собственные значения этого оператора.

Состояние такой системы можно описать двумя разными способами:

- набором собственных функций $\Psi_{m_1, m_2} = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$ операторов $\hat{j}_1^2, \hat{j}_{1z}, \hat{j}_2^2, \hat{j}_{2z}$ с собственными значениями $j_1(j_1+1), m_1, j_2(j_2+1), m_2$;
- набором собственных функций $\Phi_{jm} = |j, m; j_1, j_2\rangle$ операторов $\hat{j}^2, \hat{j}_z, \hat{j}_1^2, \hat{j}_2^2$ с собственными значениями $j(j+1), m, j_1(j_1+1), j_2(j_2+1)$.

(Функции Ψ и Φ следовало бы снабдить также индексами j_1 и j_2 , мы не выписываем их.)

◆ *Проблемой сложения моментов* называют следующий набор задач.

1. Какие значения m возможны при заданных m_1 и m_2 ?
2. Какие значения j возможны при данных j_1 и j_2 ?
3. Каковы четности суммарных состояний?
4. Ясно, что любая функция Φ может быть выражена через линейные комбинации функций Ψ , и наоборот:

$$\begin{aligned} |j, m; j_1, j_2\rangle &= \sum_{m_1} C_{m_1 m_2}^{jm} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle; \\ |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle &= \sum_{j, m} \tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm} |j, m; j_1, j_2\rangle. \end{aligned} \quad (11.2)$$

Как найти коэффициенты Клебша–Гордана C и \tilde{C} ?

◆ Отметим, что $\tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm} \langle \Phi_{jm} | \Psi_{m_1 m_2} \rangle$ и $C_{m_1 m_2}^{jm} = \langle \Psi_{m_1 m_2} | \Phi_{jm} \rangle = \left(\tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm} \right)^\dagger$. Поэтому, если выбрать коэффициенты C вещественными, то

$$C_{m_1 m_2}^{jm} = \tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm}. \quad (11.3)$$

Далее мы сначала изложим результаты, а затем опишем способ отыскания коэффициентов Клебша–Гордана и убедимся в полноте получившейся конструкции. Это и составит полное решение задачи.

Ответы на первые два вопроса составляют содержание **«векторной модели» сложения моментов**: моменты — это стрелочки длиной j_1 и j_2 , которые могут быть направлены по-разному, и их суммарные величины пробегают все возможные значения. Ответы на остальные вопросы являются специфически квантовыми.

1. Так как $\hat{j}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}$, то

$$m = m_1 + m_2. \quad (11.4a)$$

2. Величина j принимает значения

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \dots, |j_1 - j_2|. \quad (11.4b)$$

3. Четность состояний суммарного момента \mathcal{P} не определяется величиной j , но всегда $\mathcal{P} = \mathcal{P}_1 \cdot \mathcal{P}_2$, где \mathcal{P}_i — четности состояний $|j_i, m_i\rangle$. Для спинового момента понятие четности не определено (*спин — внутренняя степень свободы*).

▽ Чтобы убедиться, что в ответах (11.4) учтены все состояния, пересчитаем их в обоих описаниях системы.

Число различных состояний, определяемое через состояния складываемых моментов есть $N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. При втором описании для каждого j имеется $2j + 1$ различных значений $m = -j, -j + 1, \dots, j$. Число таких функций есть $\sum (2j + 1)$, где сумма берется по всем допустимым при данных j_1 и j_2 значениям j :

$$\begin{aligned} \sum_{|j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} (2j + 1) &= \sum_0^{j_1 + j_2} (2j + 1) - \sum_0^{|j_1 - j_2| - 1} (2j + 1) = \\ &= (j_1 + j_2 + 1)^2 - |j_1 - j_2|^2 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1). \end{aligned}$$

Как и следовало ожидать, это число совпадает с N .

□ Получим теперь (11.4б) и найдем коэффициенты C . Основная идея построения — для каждого допустимого значения суммарного момента j должны реализовываться (при различных проекциях моментов j_1 и j_2) все возможные значения проекций этого момента.

◆ Теперь мы построим векторы состояний $|j, j_z = m\rangle$, разложив их по функциям исходного базиса

$$|j_1 j_{1z} = m_1\rangle |j_2, j_{2z} = m_2\rangle.$$

Коэффициенты этого разложения и есть коэффициенты Клебша–Гордана.

◇ Начнем с одной из простейших задач сложения орбитального момента l и спинового момента, когда $j_1 = 1$, а $j_2 = 1/2$. Суммарные значения момента импульса такой системы j могут составлять $3/2$ (моменты «параллельны») и $1/2$ (моменты «антипараллельны»). Набор спиновых состояний нашей системы состоит из 6 векторов:

$$\begin{aligned} |I\rangle &\equiv |1, +1\rangle |1/2, +1/2\rangle, & |II\rangle &\equiv |1, +1\rangle |1/2, -1/2\rangle, \\ |III\rangle &\equiv |1, 0\rangle |1/2, +1/2\rangle, & |IV\rangle &\equiv |1, 0\rangle |1/2, -1/2\rangle, \\ |V\rangle &\equiv |1, -1\rangle |1/2, +1/2\rangle, & |VI\rangle &\equiv |1, -1\rangle |1/2, -1/2\rangle. \end{aligned}$$

Вектор $|I\rangle$ — единственный вектор, который отвечает проекции полного момента на ось z , равной $3/2$, в нашем случае это может реализовываться только при $j = 3/2$. Поэтому можно принять $|j = 3/2, m = 3/2\rangle = |I\rangle$.

Векторы $|II\rangle$ и $|III\rangle$ отвечают проекции полного момента на ось z , равной $1/2$, в нашем случае это может реализовываться и при $J = 3/2$, и при $J = 1/2$. Поэтому состояния $|j = 3/2, m = 1/2\rangle$ и $|j = 1/2, m = 1/2\rangle$ должны быть *суперпозициями* состояний $|II\rangle$ и $|III\rangle$.

Векторы $|IV\rangle$ и $|V\rangle$ отвечают проекции полного момента на ось z , равной $-1/2$, в нашем случае это может реализовываться и при $J = 3/2$, и при $J = 1/2$. Поэтому состояния $|j = 3/2, m = -1/2\rangle$ и $|j = 1/2, m = -1/2\rangle$ должны быть *суперпозициями* состояний $|IV\rangle$ и $|V\rangle$.

Наконец, вектор $|VI\rangle$ — единственный вектор, который отвечает проекции полного момента на ось z , равной $-3/2$, в нашем случае это может реализовываться

только при $j = 3/2$. Поэтому $|j = 3/2, m = -3/2\rangle \propto |VI\rangle$ (этот вектор может отличаться знаком от того, что получается из $|I\rangle$ многократным действием оператора \hat{j}_-).

Действие понижающего оператора $\hat{j}_- \equiv \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$ на состояние $|I\rangle \equiv |j = 3/2, m = 3/2\rangle$ превращает его в состояние $|j = 3/2, m = 1/2\rangle$ — суперпозицию состояний $|II\rangle$ и $|III\rangle$. С учетом (6.14),

$$\hat{j}_-|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle = \sqrt{3}|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle, \text{ и } \hat{j}_-|1, 1\rangle = \sqrt{2}|1, 0\rangle, \quad \hat{j}_-|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle.$$

Поэтому

$$\begin{aligned} \hat{j}_-|3/2, 3/2\rangle &= \sqrt{3}|3/2, 1/2\rangle \equiv (\hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-})|1, 1\rangle|1/2, +1/2\rangle = \\ &= \sqrt{2}(|1, 0\rangle|1/2, +1/2\rangle + |1, 1\rangle|1/2, -1/2\rangle) \Rightarrow \\ &\Rightarrow |3/2, 1/2\rangle = \left(\sqrt{2/3}|II\rangle + \sqrt{1/3}|III\rangle \right). \end{aligned}$$

Состояние $|1/2, 1/2\rangle$ строится из тех же состояний $|II\rangle$ и $|III\rangle$, и оно ортогонально к состоянию $|3/2, 1/2\rangle$. Поэтому вектор этого состояния должен иметь вид $|1/2, 1/2\rangle = (\sqrt{1/3}|II\rangle - \sqrt{2/3}|III\rangle)$ (значение общей фазы ничем не фиксируется, мы выбрали ее так, чтобы коэффициенты Клебша–Гордана оказались действительными). Коэффициенты $\pm\sqrt{1/3}$, $\sqrt{2/3}$ — это коэффициенты Клебша–Гордана в нашем случае.

Действуя таким же образом оператором $\hat{j}_- \equiv \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$ на состояния $|3/2, 1/2\rangle$, $|1/2, 1/2\rangle$, мы найдем, что

$$|3/2, -1/2\rangle = \left(\sqrt{1/3}|IV\rangle + \sqrt{2/3}|V\rangle \right), \quad |1/2, -1/2\rangle = \left(\sqrt{2/3}|IV\rangle - \sqrt{1/3}|V\rangle \right).$$

Последующее действие оператора $\hat{j}_- \equiv \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$ на состояние $|3/2, -1/2\rangle$ дает $|3/2, -3/2\rangle = |VI\rangle$, а его действие на состояние $|1/2, -1/2\rangle$ дает 0.

◆ Процедура общего случая строится по тому же образцу.

∇ В силу (11.4а), максимальное значение $m = j_1 + j_2$. Поэтому и максимальное значение $j = j_1 + j_2$. Это состояние получается единственным образом. Поэтому

$$|j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle = |j_1, m_1 = j_1\rangle|j_2, m_2 = j_2\rangle.$$

∇ Под действием оператора $\hat{j}_- \equiv \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$ это состояние переходит в $|j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2 - 1\rangle$. С учетом (6.14)

$$\begin{aligned} \hat{j}_-|j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle &= \\ &= \sqrt{2(j_1 + j_2)} \cdot |j_1 + j_2, m = j_1 + j_2 - 1\rangle \equiv \\ &\equiv (\hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-})|j_1, m_1 = j_1\rangle|j_2, m_2 = j_2\rangle = \end{aligned}$$

$$= \sqrt{2j_1} \cdot |j_1, m_1 = j_1 - 1\rangle|j_2, m_2 = j_2\rangle + \sqrt{2j_2} \cdot |j_1, m_1 = j_1\rangle|j_2, m_2 = j_2 - 1\rangle.$$

Отсюда следует

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \begin{cases} \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \cdot |j_1, j_1 - 1\rangle|j_2, j_2\rangle + \\ + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \cdot |j_1, j_1\rangle|j_2, j_2 - 1\rangle. \end{cases} \quad (11.5а)$$

Из двух векторов состояний, стоящих в правой части этого равенства, можно сформировать другой вектор состояния, ортогональный к (11.5а). Для этого состояния

снова имеем $m = j_1 + j_2 - 1$, но для него эта величина — наибольшее значение m . Поэтому оно соответствует $j = j_1 + j_2 - 1$, т. е.

$$\begin{aligned} & |j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = \\ & = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \cdot |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \cdot |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle. \end{aligned} \quad (11.56)$$

∇ Дальнейшее действие оператора \hat{j}_- на состояния (11.5) дает состояния $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2\rangle$ и $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle$. Эти два новых состояния — суперпозиции состояний старого базиса $|j_1, j_1 - 2\rangle |j_2, j_2\rangle$, $|j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle$, $|j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 2\rangle$. Сформированное из этих базисных состояний третье состояние, ортогональное к двум первым, есть $|j_1 + j_2 - 2, j_1 + j_2 - 2\rangle$.

∇ Этот процесс появления новых значений j продолжается до тех пор, пока с уменьшением m увеличивается число различных базисных функций $|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2 = m - m_1\rangle$, т. е. до $m = j_1 - j_2$ (11.46).

Итак, задача в принципе решена. Задача 10.5 дает другой метод ее решения. Коэффициенты Клебша–Гордана можно найти и в многочисленных таблицах.

∇ На языке *теории представлений групп* векторы состояний с моментом j реализуют $(2j + 1)$ -мерное неприводимое представление группы вращений. Мы решили здесь задачу о разложении произведения двух представлений по неприводимым. В частности, полученное решение означает, что произведение неприводимых представлений размерностей $2j_1 + 1$ и $2j_2 + 1$ разбивается на сумму неприводимых представлений с размерностями $2K + 1$, где K пробегает значения $j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$.

§ 11.2. Матричные элементы скаляров и векторов

11.2.1. Правила отбора

Для атома в целом момент импульса сохраняется. Поэтому его состояния можно классифицировать по значениям полного момента импульса j и его проекции на избранную ось m , обозначая через α остальные, не зависящие от момента характеристики. Нередко в этот набор полезно добавить значение четности состояния $P = \pm 1$. В изучаемые ниже вероятности переходов входят матричные элементы операторов возмущения \hat{V} по этим состояниям $|\alpha P j m\rangle$. В свою очередь, связанная с устройством нашей системы часть оператора возмущения может быть вектором (например, вектор электрического дипольного момента во взаимодействии нейтрального атома с внешним электрическим полем), псевдовектором (например, вектор магнитного момента во взаимодействии атома с магнитным полем), скаляром или псевдоскаляром, тензором второго ранга (например, тензор квадрупольного момента во взаимодействии нейтрального атома с внешним электрическим полем) и т. п. Оказывается, что для каждого из этих типов возмущения матричные элементы $\langle \alpha' P' j' m' | \hat{V} | \alpha P j m \rangle$ могут быть ненулевыми только для небольшого набора возможных пар $(P' j' m'; P j m)$. Перечисление таких возможных пар и составляет содержание **правил отбора**. Их знание резко упрощает анализ многих проблем.

•Пример. Состояния гармонического осциллятора.

Разумеется, правила отбора могут записываться и по другим квантовым числам, и мы начнем с простейшего примера. Рассмотрим набор собственных состояний осциллятора $|n\rangle$, операторы $\hat{A}_1 = a_1x$, $\hat{A}_2 = a_2x^2$, ..., $\hat{A}_k = a_kx^k$ и матричные элементы $\langle m|\hat{A}_k|n\rangle$. **Правила отбора для операторов \hat{A}_k определяют, для каких значений m и n эти матричные элементы могут отличаться от нуля.**

Напомним, что $\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{b} + \hat{b}^+)$ (4.14), а матричный элемент $\langle m|\hat{b}|n\rangle$ отличен от нуля только при $m = n - 1$ и матричный элемент $\langle m|\hat{b}^+|n\rangle$ отличен от нуля только при $m = n + 1$. Отсюда легко получается, что матричный элемент $\langle m|\hat{A}_1|n\rangle$ может отличаться от нуля только если m и n – соседние уровни, т. е. при $m = n \pm 1$ (если $n = 0$, то возможно только $m = n + 1$). Точно так же для матричный элемент $\langle m|\hat{A}_2|n\rangle$ может отличаться от нуля только при $m = n$ и при $m = n \pm 2$ (если $n = 0$, то возможно только $m = n$ и $m = n + 2$).

Условия $m = n \pm 1$ для операторов \hat{A}_1 , $m = n$ и при $m = n \pm 2$ для операторов \hat{A}_2 представляют собой правила отбора для этих операторов в осцилляторном базисе.

■ **Скалярный оператор.** Скалярным называется оператор \hat{D} , вид которого не меняется при вращениях системы координат. Такой оператор \hat{D} коммутирует с оператором момента импульса системы \hat{j} , т. е.

$$[\hat{j}_i, \hat{D}] = 0 \Rightarrow [\hat{j}_z, \hat{D}] = 0, [\hat{j}^2, \hat{D}] = 0.$$

Пусть $|jm\rangle$ — собственный вектор операторов \hat{j}^2 и \hat{j}_z с собственными значениями $j(j+1)$ и m соответственно. Поскольку $[\hat{j}_z, \hat{D}] = 0$, то и среднее $\langle j'm'|\hat{j}_z\hat{D}-\hat{D}\hat{j}_z|jm\rangle = (m' - m) \cdot \langle j'm'|\hat{D}|jm\rangle = 0$, т. е. матричный элемент $\langle j'm'|\hat{D}|jm\rangle$ может отличаться от нуля лишь при $m' = m$. Таким же образом, из соотношения $[\hat{j}^2, \hat{D}] = 0$ следует, что $\langle j'm'|\hat{j}^2\hat{D} - \hat{D}\hat{j}^2|jm\rangle = 0$, т. е. наш матричный элемент может быть отличен от нуля лишь при $j' = j$. Наконец, рассматривая матричные элементы от операторных равенств типа $\hat{j}_-\hat{D}\hat{j}_+ = \hat{D}\hat{j}_-\hat{j}_+$, получим, что обсуждаемый матричный элемент вообще не зависит от m , т. е. от направления момента импульса. В итоге

$$\langle j'm'|\hat{D}|jm\rangle = a(j) \cdot \delta_{jj'} \cdot \delta_{mm'}. \quad (11.6)$$

Если еще известны четности, то для скалярного оператора \hat{D} справа добавляется множитель $\delta_{p',p}$, а для псевдоскалярного — множитель $\delta_{-p',p}$.

■ **Векторный оператор.** В какой-нибудь прямоугольной системе координат векторный оператор \hat{V} записывается в виде набора трех операторов $\mathbf{V}_x, \mathbf{V}_y, \mathbf{V}_z$; вращение превращает этот набор в набор $(\mathbf{V}_{x'}, \mathbf{V}_{y'}, \mathbf{V}_{z'})$, компоненты которого известным образом выражаются через коэффициенты первого набора.

Заметим, что имеют место перестановочные соотношения

$$[j_z, V_z] = 0, [j_+, V_+] = 0, [j_-, V_-] = 0 \text{ (при } V_{\pm} = V_x \pm iV_y).$$

Как и для скалярного оператора, легко получается

$$\langle j', m'|[j_z, V_z]|j, m\rangle = 0 = (m - m')\langle j', m'|V_z|j, m\rangle.$$

Таким образом матричный элемент $\langle j', m'|V_z|j, m\rangle$ может отличаться от нуля только при $m' = m$. Точно так же матричные элементы $\langle j', m'|V_+|j, m\rangle$ и $\langle j', m'|V_-|j, m\rangle$ могут отличаться от нуля только если $m' = m + 1$ или $m' = m - 1$. Для операторов V_x и V_y это означает, что от нуля отличны только матричные элементы с $m' = m \pm 1$.

Мы не заготовили такого же простого аппарата для получения правил отбора по j . Для получения этих правил отбора мы воспользуемся интерпретацией задачи сложения моментов как проблемы разбиения произведения представлений группы вращения по неприводимым представлениям (конец предыдущего раздела). С этой точки зрения векторный оператор $\hat{\mathbf{V}}$ реализует 3-мерное представление группы вращений, а векторы состояния $|j, m\rangle$ — $(2j + 1)$ -мерное. Вектор состояния $\hat{\mathbf{V}}|j, m\rangle$ реализует произведение этих представлений. Оно разбивается на сумму $2K + 1$ -мерных представлений с $K = j + 1, j, j - 1$ (если $j \neq 0$, в этом случае $K = 1$). Скалярная величина $\langle j', m' | \hat{\mathbf{V}} | j, m \rangle$ может отличаться от нуля только в том случае если размерность представления бра-вектора $\langle j', m' |$ совпадает с размерностью одного из представлений, на которые разбивается $\hat{\mathbf{V}}|j, m\rangle$, т. е. при $j' = j \pm 1$ или j (если $j \neq 0$). Итак, для любого *векторного оператора* \hat{V} выполняются *правила отбора*:

$$\left. \begin{aligned} \langle j' m' | \hat{V}_i | j m \rangle &\neq 0 \text{ лишь при } j' = j, j \pm 1, \\ \langle j' m' | \hat{V}_z | j m \rangle &\neq 0 \text{ лишь при } m' = m, \\ \left\{ \begin{array}{l} \langle j' m' | \hat{V}_a | j m \rangle \neq 0 \\ \text{лишь при } m' = m \pm 1 \quad (V_a = V_x, V_y), \end{array} \right\} \\ \langle 00 | V_i | 00 \rangle &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (11.7)$$

• *Правила отбора по четности.* Напомним, что есть два типа векторов. Компоненты обычных (полярных) векторов V меняют знак при отражении координат (смещение, импульс, электрический дипольный момент, электрическое поле). Компоненты аксиального вектора A (иногда его называют псевдовектором) не меняются при отражении (вектор угловой скорости, магнитное поле, магнитный дипольный момент и т. п.). Соответственно, матричные элементы $\langle n | \hat{V}_i | m \rangle$ отличны от нуля только при различных четностях состояний $|n\rangle$ и $|m\rangle$. Точно так же матричные элементы $\langle n | \hat{A}_i | m \rangle$ отличны от нуля только при совпадающих четностях состояний $|n\rangle$ и $|m\rangle$.

11.2.2. Усреднение векторного оператора

Используя соотношения (6.2), можно убедиться, что

$$\begin{aligned} [\hat{j}^2, \hat{V}_i] &= -ie_{ijk}(\hat{J}_j \hat{V}_k + \hat{V}_k \hat{J}_j); \\ [\hat{j}^2, [\hat{j}^2, \hat{V}_i]] &= 2(\hat{j}^2 \hat{V}_i + \hat{V}_i \hat{j}^2) - 4\hat{J}_i(\hat{\mathbf{j}}\hat{\mathbf{V}}). \end{aligned} \quad (11.8)$$

Взяв от этого соотношения матричный элемент по состояниям $|jm\rangle$ и $|jm'\rangle$, т. е. записав $\langle j, m | [\hat{j}^2, [\hat{j}^2, \hat{V}_i]] | jm' \rangle = 0$, получим формулу усреднения:

$$\langle jm' | \hat{V}_i | jm \rangle = \langle jm' | \hat{J}_i | jm \rangle \frac{\langle jm | (\hat{\mathbf{j}}\hat{\mathbf{V}}) | jm \rangle}{j(j+1)}. \quad (11.9)$$

Это означает, что усредненный вектор V направлен по усредненному вектору j . (Напомним, что матричный элемент *скаляра* $\langle jm | (\hat{j}\hat{V}) | jm \rangle$ не зависит от проекции m полного момента на ось z .)

Соотношение (11.9) составляет содержание *векторной модели* для векторного оператора. Оно используется, в частности, для изучения расщепления уровней в магнитном поле (разд. 13.1.7).

§ 11.3. Задачи

1. Найти собственные значения оператора $(\hat{s}_1 \hat{s}_2)$.
2. Покажите, что при сложении двух одинаковых моментов $j_1 = j_2$ состояния с $j = 2j_1, 2j_1 - 2, 2j_1 - 4 \dots$ симметричны по перестановке m_1, m_2 , а состояния с полным моментом $j = 2j_1 - 1, 2j_1 - 3 \dots$ — антисимметричны.
3. Найти собственные функции при сложении моментов
 - a) $j_1 = 1$ и $j_2 = 2$, b) $j_1 = 1$ и $j_2 = 1$, c) $j_1 = 1$ и $j_2 = 1/2$, d) $j_1 = 1/2$ и $j_2 = 1/2$, e) $j_1 = 3/2$ и $j_2 = 2$.
4. Найти правила отбора для матричных элементов дипольного $\sum e x_i$ и квадрупольного $\sum e(x_i x_j - r^2 \delta_{ij}/3)$ моментов.
5. Покажите, что $\hat{P} = (1 + \hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2)/2$ — оператор спинового обмена, т. е. его собственные значения в состояниях с полным спином 0 и 1 есть ± 1 . (Индексы 1, 2 относятся к первой и второй частицам со спином 1/2.)
6. Пусть $\hat{j} = \hat{j}_1 + \hat{j}_2$. Покажите, что оператор $\hat{P}_{j_0} = \prod_{j_i=|j_1-j_2|, j_i \neq j_0}^{j_1+j_2} \frac{\hat{j}^2 - j_i(j_i + 1)}{j_0(j_0 + 1) - j_i(j_i + 1)}$ есть оператор проектирования на состояние с $j = j_0$.
7. Получите соотношения (11.8).
8. Показать, что коммутируют операторы \hat{H} и \hat{S}^2 , где

$$\hat{H} = -J \sum_{n,\delta} \mathbf{S}_n \mathbf{S}_{n+\delta} - 2\mu B \cdot \mathbf{S}_z, \quad \mathbf{S} = \sum_n \mathbf{S}_n.$$
9. Для системы с гамильтонианом $\hat{H} = \lambda(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_1 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_3)$ (три частицы со спином 1/2) найти уровни энергии и кратности вырождения для состояний с $S = 3/2$ и с $S = 1/2$. Найти собственные состояния $|\mathbf{S}^2, S_z\rangle$.

Глава 12

ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ

В этой главе координатой q частицы называется набор из ее пространственных \mathbf{r} и спиновых s_z координат.

§ 12.1. Волновая функция системы тождественных частиц

В классической механике одинаковые частицы считаются различными (как будто у каждой на боку можно поставить метку — номер). В квантовой механике это не так. В силу принципа неопределенности, понятие о траектории электрона теряет точный смысл, и через мгновение после того, как мы заметили два электрона, уже невозможно сказать, где первый, где — второй (разумеется, с точностью до ограничения скорости скоростью света). Принцип квантовой неразличимости частиц гласит:

$$\boxed{\text{частицы одного сорта различить невозможно.}} \quad (12.1)$$

Поэтому волновая функция пары частиц $\psi(q_1, q_2)$ при замене q_1 на q_2 определяет то же состояние, т. е.

$$\psi(q_2, q_1) = e^{i\alpha} \psi(q_1, q_2).$$

Иными словами, оператор перестановки частиц, определяемый соотношением $\hat{P}_{12}\psi(q_1, q_2) = \psi(q_2, q_1)$, имеет собственные значения $e^{i\alpha}$. Но $\hat{P}_{12}[\hat{P}_{12}\psi(q_1, q_2)] = \psi(q_1, q_2)$. Поэтому $e^{2i\alpha} = 1$, т. е. $e^{i\alpha} = \pm 1$, или

$$\psi(q_1, q_2) = \pm \psi(q_2, q_1). \quad (12.2)$$

Итак, волновая функция пары тождественных частиц либо симметрична, либо антисимметрична при их перестановке. (Разумеется, в описание входят и пространственные и спиновые переменные).

• Если волновая функция *симметрична* при перестановке пары частиц, говорят, что частицы подчиняются *статистике Бозе–Эйнштейна*, их называют **бозонами**.

• Если волновая функция *антисимметрична* при перестановке пары частиц, говорят, что частицы подчиняются *статистике Ферми–Дирака*, их называют **фермионами**.

Заметим, что мы ввели фактически оператор перестановки тождественных частиц \mathbb{P} , определяемый соотношением

$$\mathbb{P}\psi(q_1, q_2) = \psi(q_2, q_1) \quad (12.3)$$

с собственными значениями $+1$ для бозонов и -1 для фермионов.

□ В. Паули показал, что все частицы с полуцелым спином (электроны, протоны, кварки, ядра трития и т. д.) — фермионы, а все частицы с целым спином (фотоны, α -частицы, дейтоны и т.д.) — бозоны.

Волновая функция пары невзаимодействующих нетождественных частиц $\psi(q_1, q_2) = \psi_1(q_1)\psi_2(q_2)$. Если частицы тождественны, то в силу (12.2)

$$\psi(q_1, q_2) = \frac{\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) \pm \psi_1(q_2)\psi_2(q_1)}{\sqrt{2}}, \quad (12.4a)$$

знаки соответствуют $\begin{matrix} (+) — \text{бозонам,} \\ (-) — \text{фермионам.} \end{matrix}$

Соответственно, для N тождественных фермионов

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(q_1) & \psi_2(q_1) & \dots & \psi_N(q_1) \\ \psi_1(q_2) & \psi_2(q_2) & \dots & \psi_N(q_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_1(q_N) & \psi_2(q_N) & \dots & \psi_N(q_N) \end{vmatrix}. \quad (12.4b)$$

В частности, если среди волновых функций фермионов $\psi_i(q)$ есть две одинаковых, то $\Psi = 0$, т. е. имеет место **принцип Паули**:

в системе одинаковых фермионов не могут одновременно находиться в одном состоянии две (или более) частицы.

(12.4в)

В отсутствие магнитного поля волновая функция разбивается в произведение координатной и спиновой волновой функций, $\psi(q) = \psi(\mathbf{r})\chi(s_z)$. Если энергия системы не зависит от s_z (т. е. имеется вырождение по s_z), то можно образовать новый базис — суперпозицию волновых функций (12.4б). Целесообразно выбрать такие суперпозиции, чтобы при данных $\psi_i(\mathbf{r})$ спиновые волновые функции образовывали либо симметричные, либо антисимметричные комбинации. Тогда полная симметрия волновой функции (12.4б) сохранится, если использовать комбинации (для пары фермионов):

$$\psi(r_1, r_2) \cdot \chi(s_{z1}, s_{z2}) : \begin{cases} \psi(r_1, r_2) = \frac{\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) \pm \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)}{\sqrt{2}}, \\ \chi(s_{z1}, s_{z2}) = \frac{\chi_1(s_{z1})\chi_2(s_{z2}) \mp \chi_1(s_{z2})\chi_2(s_{z1})}{\sqrt{2}}. \end{cases} \quad (12.5)$$

Для пары частиц со спином $1/2$ спиновая волновая функция симметрична в состоянии, когда полный спин равен 1, и волновая функция антисимметрична в состоянии, когда полный спин равен 0. И наоборот, если полный спин состояния равен 1, пространственная волновая функция антисимметрична. Если же полный спин состояния равен 0, пространственная волновая функция симметрична.

Легко понять, что этот вывод распространяется и на систему тождественных бозонов

Пространственная волновая функция относительного движения симметрична относительно перестановки частиц, если суммарный спин системы четный, пространственная волновая функция относительного движения антисимметрична относительно перестановки частиц, если суммарный спин системы нечетный. (12.6)

Для N тождественных бозонов волновая функция образуется по тому же типу, но, в отличие от детерминанта (12.4б), куда отдельные слагаемые входят с разными знаками, для бозонов все слагаемые суммы входят со знаком *плюс*. Так, для пары бозонов, находящихся в одинаковом квантовом состоянии $\psi(q_1, q_2) = \psi_1(q_1)\psi_1(q_2)$.

Отметим, в частности, что в системе тождественных частиц с гамильтонианом, явно не зависящим от спина, спины отдельных частиц коммутируют с гамильтонианом, но по отдельности не сохраняются, поскольку они не коммутируют с оператором перестановок системы \mathbb{P} (12.3). Это можно рассматривать как пример общего обсуждения, развитого в § 2.2.

12.1.1. Обменное взаимодействие

Если учесть взаимодействие, то — в силу тождественности частиц — энергия системы зависит от суммарного спина (даже в отсутствие прямого взаимодействия между спинами). Это позволяет говорить о специфически квантовом — **обменном** взаимодействии тождественных частиц.

Это проще всего продемонстрировать на примере. Рассмотрим энергию пары электронов, считая их взаимодействие $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ возмущением. Состояниям пары электронов с полным спином $s = 0$ или 1 отвечают пространственные волновые функции

$$\Psi(1, 2) = \frac{\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) \pm \psi_1(r_2)\psi_2(r_1)}{\sqrt{2}}. \quad (12.7)$$

(Знаки «+» и «-» отвечают случаям суммарного спина 0 и 1 соответственно.)

Энергию взаимодействия электронов можно вычислить как $\langle U \rangle = \iint \Psi^* U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \Psi d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2$. Подставив в этот интеграл (12.7), получим

$$\langle U \rangle = \begin{cases} A + J & (s = 0), \\ A - J & (s = 1). \end{cases} \quad (12.8)$$

Здесь

$$A = \iint d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 U_{12} |\psi_1(r_1)|^2 |\psi_2(r_2)|^2, \\ J = \iint d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 U_{12} \psi_1(r_1) \psi_2^*(r_1) \psi_2(r_2) \psi_1^*(r_2).$$

Чтобы получить другую форму равенства (12.8), запишем выражение для квадрата вектора \hat{s} , равного сумме векторов спина двух электронов $\hat{s}_1 + \hat{s}_2$,

$$\hat{s}^2 = \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2\hat{s}_1\hat{s}_2 = 3/2 + 2(\hat{s}_1\hat{s}_2)$$

(напомним, что $\hat{s}_1^2 = \hat{s}_2^2 = 1/2(1 + 1/2) = 3/4$).

В состоянии с полным спином 1 правая часть равна 2, а в состоянии с полным спином 0 правая часть равна 0. Поэтому можно записать

$$\frac{1}{2} + 2\hat{s}_1\hat{s}_2 = \begin{cases} 1 & \text{при } s = 1, \\ -1 & \text{при } s = 0. \end{cases}$$

Подставляя это равенство в (12.8), найдем удобную для дальнейшего форму этого выражения

$$\langle U \rangle = \bar{A} - 2J\hat{s}_1\hat{s}_2, \quad (\bar{A} = A - J/2). \quad (12.9)$$

Величину J называют *обменным интегралом*. Этот интеграл обычно на порядок меньше кулоновской энергии (из-за не очень сильного пространственного перекрытия волновых функций) — в отличие от взаимодействий, связанных со спином через его магнитные свойства (последние дают энергии по крайней мере в $\alpha^2 \sim 10^{-4}$ раз меньше атомных).

Именно такое — *обменное* — взаимодействие ответственно за ферромагнетизм кристаллов, которое представляет собой упорядочение спинов (т. е. и магнитных моментов) атомов кристалла. Действительно, соотношение (12.8) показывает, что при $J > 0$ энергетически выгодно, чтобы спины выстраивались параллельно друг другу. В веществе это соответствует ферромагнитному упорядочению. Если $J < 0$, то энергетически выгодно, чтобы соседние спины выстраивались антипараллельно друг другу. В веществе это соответствует антиферромагнитному упорядочению. В анизотропных кристаллах возникают и более сложные структуры. (Подробнее ферромагнетизм обсуждается во 2 части настоящего курса.)

Спиновое происхождение ферромагнетизма означает, что гиромагнитное отношение для вещества M/L должно быть вдвое больше своего классического значения. Эйнштейн придумал опыт для проверки этого утверждения. Он состоял в измерении момента импульса первоначально неподвижного диска в результате перемагничивания с периодом, равным периоду крутильных колебаний цилиндра. Такой опыт был впервые выполнен де Гаазом.

§ 12.2. Понятие о вторичном квантовании

При изучении систем, состоящих из большого числа одинаковых частиц, применяют метод *вторичного квантования*. Такой подход особенно продуктивен для описания систем с переменным числом частиц — в физике элементарных частиц и в физике твердого тела. Простейший пример такого рода был фактически развит в применении к линейным цепочкам § 8.3.

В первой главе мы ввели понятие *пространства состояний квантовой системы*, активно использовали тот факт, что в этом пространстве существует некоторый ортонормированный базис, который образует *полную систему функций*, и обсуждали правила перехода от одного такого базиса к другому. Мы говорили, что

такой базис образует, в частности, набор собственных функций эрмитова оператора, например, гамильтониана.

При переходе к многочастичным системам, в которых к тому же число частиц может не сохраняться, геометрия пространства состояний усложняется. Чтобы обойти эти усложнения, рассматривают мысленно переход системы из начального состояния при $t \rightarrow -\infty$ в конечное при $t \rightarrow \infty$. Предполагают, что в эти моменты отдельные частицы разошлись так далеко, что взаимодействием между ними можно пренебречь. При этом пространство состояний оказывается прямым произведением одночастичных *асимптотических состояний*, с учетом тождественности частиц. Подчеркнем, что в этом случае в набор асимптотических состояний попадают все состояния, которые в отсутствие внешних воздействий могут существовать неограниченно долго, т. е. например, кроме электронов и протонов следует учитывать в этом наборе и атомы водорода. Далее все состояния раскладывают по базису, задаваемому этими асимптотическими состояниями.

При этом (В. А. Фок) полное пространство состояний расслаивается на пространства — слои, отвечающие различным числам тождественных частиц (одноэлектронное, двухэлектронное с одним фотоном и т. п.). Взаимодействие приводит к изменению состояний частиц в одном слое и (или) к переходу системы из одного слоя в другой (например, ионизацию атома водорода под действием света можно описать как переход из слоя, отвечающего состояниям «атом водорода + фотон» в слой, отвечающий состояниям «протон + электрон», химическую реакцию $H_2 \leftrightarrow 2H$ можно описать как переход между слоями, отвечающим атомным и молекулярным состояниям водорода).

Далее мы будем говорить для определенности о тождественных частицах только одного сорта. Обобщение на случай частиц разных сортов не вызывает трудностей.

Обозначим через $\hat{H}^{(1)}$ гамильтониан, описывающий одну частицу, и перенумеруем собственные состояния одночастичного гамильтониана $\hat{H}^{(1)}$ числами 1, 2, ... (Обычно имеют в виду, что система помещена в конечный объем. Это позволяет вести обсуждение в терминах дискретного спектра.) Состояние системы однозначно определяется записью такого послойного пространства состояний и набором *чисел заполнения* — чисел частиц, находящихся в каждом из состояний (для каждого из слоев).

При учете взаимодействия числа заполнения начинают эволюционировать со временем, и эта эволюция описывается гамильтонианом, записанным в представлении вторичного квантования.

Вторичным квантованием называется запись волновой функции в представлении чисел заполнения N_1, N_2, \dots , т. е. в виде таблицы значений этих чисел $|\Phi\rangle \equiv |N_1, N_2, \dots\rangle$, и соответствующая запись операторов.

Этот метод развивает подход, использовавшийся при описании гармонического осциллятора. Состояние осциллятора $|n\rangle$ полностью определяется заданием числа n . Мы выяснили, что это состояние может рассматриваться как состояние с n вибронами, которое получается из основного n -кратным действием оператора рождения \hat{b}^+ на основное состояние $|0\rangle$.

Подобным образом переходы между различными состояниями многочастичной системы в методе вторичного квантования описываются операторами рождения и уничтожения, как и в задаче об осцилляторе. В случае бозе-частиц их матричные элементы имеют такой же вид, как и для осциллятора (4.11):

$$\hat{b}_i |N_1, N_2 \dots N_i = n \dots\rangle = \sqrt{n} |N_1, N_2 \dots N_i = n - 1 \dots\rangle, \quad (12.10)$$

$$\hat{b}_i^+ |N_1, N_2 \dots N_i = n \dots\rangle = \sqrt{n + 1} |N_1, N_2 \dots N_i = n + 1 \dots\rangle.$$

В частности, любое состояние можно получить действием необходимого числа операторов рождения на вакуумное (основное) состояние $|0\rangle$ (состояние, в котором нет частиц):

$$|N_1 \dots, N_k \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1! \dots N_k! \dots}} (\hat{b}_1^+)^{N_1} \dots (\hat{b}_k^+)^{N_k} \dots |0\rangle. \quad (12.11)$$

Переход одной частицы из состояния «а» в состояние «b» описывается оператором $\hat{b}_b^+ \hat{b}_a$:

$$\begin{aligned} & \hat{b}_b^+ \hat{b}_a | \dots, N_a = n_a, \dots, N_b = n_b, \dots \rangle = \\ & = \sqrt{(n_b + 1) n_a} | \dots, N_a = n_a - 1, \dots, N_b = n_b + 1, \dots \rangle. \end{aligned}$$

По определению, операторы рождения и уничтожения, действующие на разные состояния, коммутируют друг с другом. Поэтому имеют место естественные обобщения перестановочных соотношений (4.4)

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_k^+] = \delta_{ik}, \quad [\hat{b}_i, \hat{b}_k] = 0, \quad [\hat{b}_i^+, \hat{b}_k^+] = 0. \quad (12.12)$$

Для ферми-частиц числа заполнения N_i могут принимать только значения 0 и 1, и соответствующие операторы рождения и уничтожения антикоммутируют (*что гарантирует выполнение принципа Паули*), т. е.

$$\hat{a}_i \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_i = \delta_{ik}, \quad \hat{a}_i \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_i^+ = 0. \quad (12.13)$$

◆ Далее нередко переходят к операторам $\hat{\psi}$ в q -представлении (ср. обозначения § 1.4):

$$\hat{\psi}(q) = \sum_i \hat{b}_i \langle q|i\rangle, \quad \hat{\psi}^+(q) = \sum_i \hat{b}_i^+ \langle i|q\rangle. \quad (12.14)$$

Эти соотношения выглядят как разложение волновой функции по базису $\langle q|i\rangle$, коэффициенты которого \hat{b} стали операторами.

Если базис $\langle q|i\rangle$ — ортонормированный, то перестановочные соотношения (12.12) принимают вид

$$[\hat{\psi}(q), \hat{\psi}(q')] = 0, \quad [\hat{\psi}(q), \hat{\psi}^+(q')] = \delta(q - q'). \quad (12.15)$$

Разумеется, подобные операторы должны быть введены для каждого сорта встречающихся частиц. Как отмечено выше, для фермионов и бозонов алгебры немного различаются.

§ 12.3. Квантование электромагнитного поля

Важное применение развитой выше схемы доставляет случай электромагнитного поля. Мы представим поле как сумму внешнего поля, задаваемого макроскопическими источниками, и зависящего от координат и времени поля излучения, например,

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}^{ex} + \mathcal{E}^{rad} \text{ при } \langle \mathcal{E}^{rad} \rangle = 0.$$

Поскольку уравнения электродинамики (уравнения Максвелла) линейны, можно отдельно изучать эти уравнения для внешнего поля и для поля излучения. При этом после усреднения по объему и (или) времени, например, энергия поля складывается из энергий внешнего поля и поля излучения (интерференционный вклад, отвечающий их произведению, после усреднения обращается в ноль). Ниже мы считаем, что внешние поля учтены в описании состояний изучаемых атомных систем и подробно рассматриваем только поле излучения, не указывая более значка rad .

Прежде, чем выполнять квантование, мы обсудим случай неквантованного электромагнитного поля (см. курс электродинамики, например, [18]).

12.3.1. Неквантованное электромагнитное поле

Описание переменного электромагнитного поля, используемое в задачах квантовой механики, по форме немного отличается от того, что использовалось в курсе электродинамики. Главное отличие иллюстрируется примером плоской электромагнитной волны

$$\mathcal{E}(\mathbf{r}, t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega t - \mathbf{kr} + \phi), \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{B}_0 \cos(\omega t - \mathbf{kr} + \phi). \quad (12.16a)$$

В курсе электродинамики взамен этого поля изучают *нефизический объект* — комплексное поле

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{ED}(\mathbf{r}, t) &= \mathcal{E}_0^{ED} e^{-i(\omega t - \mathbf{kr} + \phi)}, & \mathbf{B}^{ED}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{B}_0^{ED} e^{-i(\omega t - \mathbf{kr} + \phi)}, \\ \mathcal{E} &= \text{Re } \mathcal{E}^{ED}, & \mathbf{B} &= \text{Re } \mathbf{B}^{ED}. \end{aligned} \quad (12.16б)$$

Для этих комплексных полей \mathcal{E}^{ED} , \mathbf{B}^{ED} многие вычисления упрощаются. Физические величины определяются как действительные части получающихся выражений.

◇ В задачах квантовой механики такой способ действий неудобен. Дело в том, что волновая функция, вообще говоря, комплексна. Поэтому «выпутывание» физического ответа с помощью взятия действительной части становится затруднительным, и не используется.

В этих задачах исходным является преобразование Фурье

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathcal{E}_0^{QM} e^{-i(\omega t - \mathbf{kr} + \phi)} + \mathcal{E}_0^{*QM} e^{i(\omega t - \mathbf{kr} + \phi)}, \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{B}_0^{QM} e^{-i(\omega t - \mathbf{kr} + \phi)} + \mathbf{B}_0^{*QM} e^{i(\omega t - \mathbf{kr} + \phi)}. \end{aligned} \quad (12.16в)$$

Видно, что введенные таким способом амплитуды различаются вдвое.

$$\mathcal{E}_0^{ED} = 2\mathcal{E}_0^{QM}, \quad \mathbf{B}_0^{ED} = 2\mathbf{B}_0^{QM}. \quad (12.16г)$$

В большинстве вычислений достаточно следить за положительно-частотной частью $\mathcal{E}_0^{QM} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \phi)}$. Для нее многие выкладки выглядят так же, как в курсе электродинамики (а отрицательно-частотная часть получается из положительно-частотной с помощью комплексного сопряжения). В частности, уравнения Максвелла имеют вид $[\mathbf{k} \times \mathbf{B}] = (\omega/c)\mathcal{E}$ и $[\mathbf{k} \times \mathcal{E}] = -(\omega/c)\mathbf{B}$. Однако, в силу (12.16г) некоторые из получающихся ответов по форме отличаются от привычных в электродинамике множителем 2 или 4. Например, для монохроматической волны усредненный по времени вектор потока энергии (вектор Пойнтинга) есть

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} [\mathcal{E} \times \mathbf{B}] = \frac{c}{8\pi} \frac{\mathbf{k}}{k} |\mathcal{E}_0^{ED}|^2 \equiv \frac{c}{2\pi} \frac{\mathbf{k}}{k} |\mathcal{E}_0^{QM}|^2. \quad (12.17)$$

• Описание электромагнитного поля с помощью шести компонент электрического и магнитного полей избыточно. Как известно, его можно заменить описанием с помощью четырехмерного вектора-потенциала A^μ , через который электрическое и магнитное поля выражаются соотношениями

$$\mathcal{E} = -\nabla\phi - \partial\mathbf{A}/(c\partial t), \quad \mathbf{B} = [\nabla \times \mathbf{A}], \quad (12.18)$$

и который в случае плоской волны имеет Фурье-разложение

$$A^\mu(\mathbf{r}, t) = A_0^{\mu QM} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \phi)} + A_0^{\mu *QM} e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \phi)}. \quad (12.19)$$

Ниже мы используем разложение Фурье (12.16в), опуская значок QM .

◊ Однако, вектор-потенциал — релятивистский вектор с четырьмя компонентами, а электромагнитная волна в вакууме имеет лишь две независимых поляризации. Значит, надо избавиться от двух лишних компонент.

Для этого полезно вспомнить, что один и тот же набор наблюдаемых полей можно описать с помощью различных выражений для векторного потенциала (*градиентная инвариантность*). Эта неоднозначность обсуждается в разд. 10.4. Для более удобного решения различных возникающих задач можно по-разному распоряжаться этой неоднозначностью. В частности, дальнейшее описание **удобно** вести в *кулоновской калибровке* (10.21), где скалярный потенциал $\phi = 0$ и $\nabla\mathbf{A} = 0$. При этом векторный потенциал удовлетворяет волновому уравнениям

$$(1/c^2)\partial^2\mathbf{A}/\partial t^2 - \Delta\mathbf{A} = 0, \quad \text{div}\mathbf{A} = 0. \quad (12.20)$$

• В кулоновской калибровке (10.21) связь положительно-частотных амплитуд полей с положительно-частотными амплитудами вектора-потенциала и следствия из уравнений Максвелла для полей записываются в виде хорошо известного набора соотношений

$$\mathcal{E} = i\omega\mathbf{A}/c, \quad \mathbf{B} = i[\mathbf{k} \times \mathbf{A}], \quad \omega^2 = c^2\mathbf{k}^2, \quad (\mathbf{k}\mathbf{A}) = 0. \quad (12.21)$$

Последнее соотношение описывает тот факт, что вектор \mathbf{A} ортогонален вектору \mathbf{k} , т. е. имеет лишь две независимых компоненты (две поляризации).

Пару векторов поляризации $\varepsilon(\mathbf{k}, \lambda)$ ($\lambda = 1, 2$) выбирают обычно так, что они образуют базис в плоскости, ортогональной вектору \mathbf{k} , т. е. удовлетворяют условиям поперечности, ортогональности и полноты,

$$\begin{aligned} (\mathbf{k} \cdot \varepsilon(\mathbf{k}, \lambda)) &= 0, & (\varepsilon^*(\mathbf{k}, \lambda) \cdot \varepsilon(\mathbf{k}, \lambda')) &= \delta_{\lambda\lambda'}, \\ \sum_{\lambda} \varepsilon_i^*(\mathbf{k}, \lambda) \varepsilon_j(\mathbf{k}, \lambda) &= \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}. \end{aligned} \quad (12.22)$$

В частности для волны, распространяющейся вдоль оси z , для которой $\mathbf{k} = (0, 0, k)$ базис линейных поляризаций имеет вид $\varepsilon_{\mathbf{k}1}^{\ell} = (1, 0, 0)$, $\varepsilon_{\mathbf{k}2}^{\ell} = (0, 1, 0)$. В базисе циркулярных поляризаций $\varepsilon_{\mathbf{k}\pm}^{\ell} = (\mp\lambda, i, 0)/\sqrt{2}$.

Ниже мы предполагаем выполненным разложение вектора-потенциала по базису векторов поляризации.

12.3.2. Электромагнитное поле в кубе. Осцилляторы поля

Рассмотрим электромагнитное поле внутри куба со стороной L с периодическими граничными условиями. Это поле — набор плоских волн с дискретным рядом значений компонент волнового вектора $k_i = 2\pi n_i/L$, где n_i — целые числа, для которых выполняется условие ортогональности $\int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} d^3r = L^3 \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$.

Общее выражение для энергии поля $\mathcal{E} = L^3(\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2)/(8\pi)$ для каждой моды колебаний (компоненты Фурье с заданным волновым вектором и поляризацией) можно выразить с помощью (12.18), (12.21) в виде

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}, \lambda, t) = \frac{L^3}{4\pi} \left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{k}, \lambda, t)}{\partial t} \frac{\partial \mathbf{A}^*(\mathbf{k}, \lambda, t)}{\partial t} + \mathbf{k}^2 \mathbf{A}(\mathbf{k}, \lambda, t) \mathbf{A}^*(\mathbf{k}, \lambda, t) \right). \quad (12.23)$$

Мы использовали здесь, что в силу условия калибровки $(\mathbf{k}\mathbf{A}(\mathbf{k}, \lambda, t)) = 0$ можно записать $[\mathbf{k} \times \mathbf{A}(\mathbf{k}, \lambda, t)]^2 = \mathbf{k}^2 \mathbf{A}^2(\mathbf{k}, \lambda, t)$.

Таким образом, энергия каждой моды колебаний имеет вид энергии гармонического осциллятора со смещением \mathbf{A} , скоростью $\partial \mathbf{A}/\partial t$, частотой $\omega = ck$ и «массой» $L^3/(4\pi c^2)$. Мы представили электромагнитное поле в нашей полости как набор независимых гармонических осцилляторов — *осцилляторов поля* — по два для каждого \mathbf{k} . Поэтому здесь полностью применимы результаты § 4.1.

12.3.3. Квантование поля

Квантование поля сводится теперь к квантованию отдельных осцилляторов поля по образцу § 4.1. Для каждого осциллятора мы выразим соответствующую гармонику поля через операторы рождения и уничтожения (4.3), заметив, что величина, подобная (4.2а) есть $x_0 = \sqrt{\hbar \cdot 4\pi c^2 / (\omega L^3)}$. При этом полный вектор-потенциал в момент времени $t = 0$ есть сумма вкладов всех гармоник — оператор

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}} \left(\hat{b}(\mathbf{k}, \lambda) \varepsilon(\mathbf{k}, \lambda) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \hat{b}^+(\mathbf{k}, \lambda) \varepsilon^*(\mathbf{k}, \lambda) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \right). \quad (12.24)$$

Зависимость от времени определяется обычным образом, это множитель $e^{-i\omega t}$ для первого слагаемого и множитель $e^{i\omega t}$ для второго слагаемого.

Полезно записать еще выражения для электрического и магнитного полей через операторы рождения и уничтожения. С учетом (12.21) имеем

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{i\omega_{\mathbf{k}}}{c} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}}L^3}} \left(\hat{b}(\mathbf{k}, \lambda)\varepsilon^*(\mathbf{k}, \lambda)e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{b}^+(\mathbf{k}, \lambda)\varepsilon(\mathbf{k}, \lambda)e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \right), \\ \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}}L^3}} \left[i\mathbf{k} \times \left(\hat{b}(\mathbf{k}, \lambda)\varepsilon^*(\mathbf{k}, \lambda)e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{b}^+(\mathbf{k}, \lambda)\varepsilon(\mathbf{k}, \lambda)e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \right) \right].\end{aligned}\quad (12.25)$$

Теперь выражения для операторов энергии и импульса поля принимают вид, совпадающий с известными выражениями для гармонического осциллятора. В частности, гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{H}_{\mathbf{k}\lambda}, \quad \hat{H}_{\mathbf{k}\lambda} = \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(\hat{n}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) \equiv \hbar\omega_{\mathbf{k}} \left(\hat{b}^+(\mathbf{k}, \lambda)\hat{b}(\mathbf{k}, \lambda) + \frac{1}{2} \right). \quad (12.26)$$

Операторы $\hat{b}^+(\mathbf{k}, \lambda)$ и $\hat{b}(\mathbf{k}, \lambda)$ описывают рождение и уничтожение квантов электромагнитного поля — **фотонов** с заданными волновым числом и поляризацией, эти операторы не действуют на состояния фотонов с другими квантовыми числами \mathbf{k}' и (или) λ' .

Условие кулоновской калибровки для векторного потенциал (12.24) выглядит как равенство нулю коммутатора

$$[\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})] = 0. \quad (12.27)$$

Чтобы убедиться в справедливости этого соотношения, достаточно вспомнить, что $[\hat{\mathbf{p}}, e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}] = -i\hbar\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. С учетом этого коммутатор (12.27) выглядит в точности как (12.24) с заменой $\varepsilon(\mathbf{k}, \lambda)$ на скалярное произведение $i\hbar\mathbf{k}\varepsilon(\mathbf{k}, \lambda)$, которое равно нулю (*поперечность световой волны*).

∇ Пусть $|n_1(\mathbf{k}, \lambda_1), n_2(\mathbf{k}, \lambda_2), n_3(\mathbf{k}', \lambda), \dots\rangle$ — состояние, содержащее $n_i(\mathbf{k}_i, \lambda_i)$ фотонов с волновыми векторами \mathbf{k}_i и поляризацией λ_{k_i} . Энергия и полный импульс этого состояния равны

$$E = \sum_{\mathbf{k}\lambda} n(\mathbf{k}, \lambda)\hbar\omega_{\mathbf{k}\lambda} + E_0, \quad E_0 = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}\lambda}/2, \quad P = \sum_{\mathbf{k}\lambda} n(\mathbf{k}\lambda)\hbar\mathbf{k}. \quad (12.28)$$

Здесь E_0 — энергия «нулевых колебаний вакуума». Ее обычно отбрасывают, переходя к другому началу отсчета энергии (см. впрочем, § 4.3).

В точности так же, как для обычного гармонического осциллятора § 4.1, имеют место соотношения

$$\begin{aligned}& \hat{b}^+(\mathbf{k}, \lambda_1)|n_1(\mathbf{k}, \lambda_1), n_2(\mathbf{k}, \lambda_2), n_3(\mathbf{k}', \lambda), \dots\rangle = \\ &= \sqrt{n_1(\mathbf{k}, \lambda_1) + 1}|n_1(\mathbf{k}, \lambda_1) + 1, n_2(\mathbf{k}, \lambda_2), n_3(\mathbf{k}', \lambda), \dots\rangle \\ & \hat{b}(\mathbf{k}, \lambda_2)|n_1(\mathbf{k}, \lambda_1), n_2(\mathbf{k}, \lambda_2), n_3(\mathbf{k}', \lambda), \dots\rangle = \\ &= \sqrt{n_2(\mathbf{k}, \lambda_2)}|n_1(\mathbf{k}, \lambda_1) + 1, n_2(\mathbf{k}, \lambda_2) - 1, n_3(\mathbf{k}', \lambda), \dots\rangle\end{aligned}$$

В соответствии с (12.24) это означает, что действие оператора векторного потенциала (или оператора электрического или магнитного поля) может описывать излучение и (или) поглощение одного (любого) фотона. В частности, для состояния с фотонами одного сорта для излучения и поглощения фотонов имеют место соотношения

$$\begin{aligned} \langle n(\mathbf{k}, \lambda) + 1, t | \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) | n(\mathbf{k}, \lambda), t \rangle &= \sqrt{n(\mathbf{k}, \lambda) + 1} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}} \varepsilon^*(\mathbf{k}, \lambda) e^{i(\omega_k t - \mathbf{k}\mathbf{r})}, \\ \langle n(\mathbf{k}, \lambda) - 1, t | \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) | n(\mathbf{k}, \lambda), t \rangle &= \sqrt{n(\mathbf{k}, \lambda)} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}} \varepsilon(\mathbf{k}, \lambda) e^{-i(\omega_k t - \mathbf{k}\mathbf{r})}. \end{aligned} \quad (12.29)$$

Излучение из состояния, в котором первоначально не было фотонов данного сорта, называют *спонтанным*. Если же такие фотоны уже были в системе, мы говорим о *вынужденном излучении или поглощении* (см. подробнее гл. 16).

♦ **Пример.** Обсудим, какая минимальная энергия сигнала $W = \hbar\omega N$ нужна, чтобы наблюдать вращение его плоскости поляризации на малый угол ϕ в оптически активной среде [10] (N — число фотонов в сигнале).

Пусть волна распространяется в направлении оси z , а вектор ее поляризации первоначально направлен вдоль оси x . При этом амплитуда электрического поля есть $\mathcal{E}_{x0} \approx \sqrt{2\pi\hbar\omega N}$. При повороте плоскости поляризации на малый угол ϕ появляется небольшая составляющая поля, направленная вдоль оси y , $\mathcal{E}_{y0} = \mathcal{E}_{x0}\phi$. Минимальное значение этой амплитуды, отвечающее регистрации одного фотона есть $\mathcal{E}_{y0} \approx \sqrt{2\pi\hbar\omega}$, оно достигается при $\phi\sqrt{N} = 1$. Таким образом $N \approx 1/\phi^2$, и искомая энергия составляет $W \approx \hbar\omega/\phi^2$.

♦ **Замечание.** Условие кулоновской калибровки (10.21) не ковариантно. В частности, переход в движущуюся систему отсчета изменяет набор ненулевых компонент вектора-потенциала. Тем не менее фотон обладает всеми свойствами обычной частицы — энергией $\hbar\omega$ и импульсом $\hbar\mathbf{k}$. Квантование, основанное на ковариантном условии калибровки (например, на условии Лоренца $\partial_\mu A_\mu = 0$), выглядит несколько более громоздко, чем приведенное выше.

♦ Тот факт, что фотоны описывают векторное поле, записывают, говоря, что его спин равен 1. Как и всякая частица, фотон может иметь еще орбитальный момент (целочисленный) ℓ и соответственно полный момент $\mathbf{j} = \ell + \mathbf{s}$. Оказывается, что для частицы, движущейся со скоростью c , разделение на спин и орбитальный момент серьезного смысла не имеет. Утверждение, что спин фотона равен 1 означает только, что наименьшее значение j равно 1 и что четность волновой функции фотона может быть и положительной и отрицательной.

■ **Газ излучения.** Рассмотрим теперь газ фотонов (его тоже иногда называют излучением) в кубической полости, который находится в тепловом равновесии со стенками. Плотность энергии электромагнитного поля $U(\omega)$ в интервале частот $d\omega$ стандартным образом выражается через усредненный по направлениям квадрат амплитуды поля в волне. С другой стороны в рассматриваемом газе заселенность $n_{\mathbf{k}\lambda}$ не зависит от направления векторов \mathbf{k} и ε . Поэтому та же плотность энергии выражается через энергию одного фотона и плотность числа состояний на единицу

объема в этом интервале $\rho(\omega) = \omega^2/(\pi^2 c^3)$ (14.25в):

$$U(\omega)d\omega = \frac{\langle \mathcal{E}^2(\omega) + \mathbf{B}^2(\omega) \rangle}{2 \cdot 8\pi} V \rho(\omega) d\omega = \frac{\langle \mathcal{E}^2(\omega) \rangle}{8\pi} V \rho(\omega) d\omega = n(\mathbf{k}\lambda) \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} d\omega. \quad (12.30)$$

(Множитель 2 в знаменателе возник при усреднении величины $\cos^2(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})$ по времени.)

§ 12.4. Системы с взаимодействием

Гамильтониан системы можно представить в виде суммы одночастичных гамильтонианов $\hat{H}_a^{(1)}$, каждый из которых описывает состояния отдельной частицы a , и добавки \hat{V} , описывающей взаимодействие:

$$\hat{H} = \sum_a \hat{H}_a^{(1)} + \hat{V}. \quad (12.31)$$

Пусть теперь взаимодействие \hat{V} складывается из энергий взаимодействия пар частиц $\hat{V} = \sum H^{(2)}(ab)$. Здесь a и b обозначают координаты частиц a и b . (Если необходимо учесть трехчастичные взаимодействия, это делается точно таким же образом.)

Обозначим через $|i\rangle$ собственные векторы одночастичного гамильтониана $\hat{H}^{(1)}$ и через E_i соответствующие значения энергии так, что

$$\hat{H}^{(1)} = \sum E_i |i\rangle\langle i|. \quad (12.32a)$$

В этом базисе оператор $\hat{H}^{(2)}$ записывается в виде матрицы

$$H_{ii'kk'}^{(2)} = \langle i|\langle i'|H_{ab}^{(2)}|k\rangle|k'\rangle.$$

В представлении чисел заполнения нетрудно получить (подобно тому, как это делалось при описании разных операторов в энергетическом представлении для осциллятора)

$$\hat{H} = \sum_i E_i^{(1)} b_i^+ b_i + \hat{V} \equiv \sum E_i N_i + \hat{V}, \quad \hat{V} = \sum_{i,i',k,k'} H_{ii'kk'}^{(2)} b_i^+ b_{i'}^+ b_k b_{k'}. \quad (12.32б)$$

Подобные представления можно построить и для других операторов. В силу тождественности частиц операторы физических величин исчерпываются такими наборами.

Используя соотношения (12.14), взамен (12.32б) можно записать также

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \int \hat{\psi}^+(q) \hat{H}^{(1)} \hat{\psi}(q) dq; \\ \hat{H}_2 &= \int \hat{\psi}^+(q) \hat{\psi}^+(q') \hat{H}^{(2)} \hat{\psi}(q') \hat{\psi}(q) dq dq'. \end{aligned} \quad (12.33)$$

12.4.1. О взаимодействии электронов с решеткой

В кристаллах за счет колебаний ионы смещены от положения равновесия, так что электроны движутся в потенциале, отличающемся от периодического. Пока отклонения от положения равновесия невелики (т. е. число фононов мало), их можно описать как возмущения. Изменение энергии электрона из-за смещения иона от равновесного положения выражается через потенциал поля, создаваемого ионами $U(x)$, и плотность числа электронов $\rho(x) = \psi^*(x)\psi(x)$ описывается выражением $V_1 = -e\rho(x)dU/dx\Delta x$. При небольших отклонениях от равновесия сила пропорциональна смещению, $edU/dx = -F$. В итоге, суммируя по всем ионам, получаем

$$V = \sum V_n = F \sum_n \psi^*(x_n)\psi(x_n)\Delta x_n.$$

Выполним разложение по собственным функциям оператора конечного сдвига — преобразование Фурье. Для смещений оно дается соотношениями (8.25), а для электронов — соотношениями (8.8). В методе вторичного квантования коэффициенты последнего разложения приобретают смысл операторов рождения и уничтожения электронов. С учетом ортонормированности собственных функций оператора сдвига из выписанного выражения получается *гамильтониан электрон-фононного взаимодействия* (Фрелиха), где сумма берется по всем значениям квазиимпульсов p и k , а $u_p(x)$ — блоховская амплитуда (8.6):

$$\hat{V} = \sum_{p,k} \frac{g_{pk}}{N\sqrt{M\omega_k}} \hat{a}_p^+ \hat{a}_{p-k} (\hat{b}_k + \hat{b}_{-k}^+), \quad (12.34)$$

$$g_{pk} = F \int_{cell} u_p(x)u_{p-k}(x)dx.$$

(Последний интеграл берется по элементарной ячейке.)

Такой гамильтониан используется для описания процессов в кристаллах. В частности, в середине 1950-х г. при экспериментальном исследовании сверхпроводимости был обнаружен изотопический эффект — зависимость температуры сверхпроводящего перехода от массы изотопа. Подобная зависимость отсутствует в гамильтониане электрон-электронного взаимодействия, но присутствует в гамильтониане взаимодействия электрона с решеткой (12.34). Поэтому обнаружение изотопического эффекта послужило основой для понимания того факта, что сверхпроводимость обусловлена электрон-фононным взаимодействием. Вскоре после этого и была построена микроскопическая теория сверхпроводимости.

§ 12.5. Задачи

1. Покажите, что независимо от величины спина каждой из пары частиц координатная волновая функция симметрична при четном суммарном спине и антисимметрична при нечетном суммарном спине.
2. Найти энергетический спектр системы из двух тождественных частиц с потенциалом взаимодействия $U = k(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2/2$ при различных значениях полного спина системы, считая частицы
 - 1) бесспиновыми;

- 2) имеющими спин $1/2$ (электронами);
 3) имеющими спин 1 .
3. Два фермиона помещены в поле $kx_i^2/2$ и взаимодействуют по закону bx_1x_2 . В 1-м порядке теории возмущений найти поправки к 4 низшим уровням в состояниях с различным полным спином. Сравнить с точным решением.
4. Две частицы в параллелепипеде с ребрами a, b, c взаимодействуют по закону $\mathcal{U} = \mathcal{U}_0\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$. Найти поправки первого порядка к энергиям двух нижних состояний, считая частицы
- 1) различными (с равными и с неравными массами);
 - 2) тождественными со спином 0 ;
 - 3) тождественными со спином $1/2$.
- В последнем случае определить вероятность того, что обе частицы находятся в левой половине объема при заданном полном спине s .
5. Найти собственные значения и собственные векторы операторов, построенных для двух осцилляторов:
- $$\hat{B} = \hat{b}_1^+\hat{b}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_1, \quad \hat{C} = i(\hat{b}_1\hat{b}_2^+ - \hat{b}_2\hat{b}_1^+).$$
6. Покажите, что из инвариантности гамильтониана относительно преобразования $a \rightarrow e^{-i\alpha}a, a^+ \rightarrow e^{i\alpha}a^+$ следует сохранение числа частиц $\hat{a}^+\hat{a}$.

Глава 13

АТОМЫ И МОЛЕКУЛЫ

Как известно, атомы состоят из электронов и положительно заряженных ядер, размеры которых значительно меньше атомных размеров. Атом электрически нейтрален, заряд ядра равен (с точностью до знака) сумме зарядов входящих в атом электронов. Устойчивость атома обеспечивается притяжением электронов к ядрам, имеющим заряд Ze и массу $M_A \approx Am_p$ (A — атомный вес в единицах массы протона); атом содержит Z электронов. При описании молекулы массы входящих в нее атомов обозначаются через M_i . В обоих этих случаях рассматривается только движение относительно центра масс, в атоме он практически совпадает с ядром.

Порядки величин.

◇ Характерные величины энергии связи электронов в атоме определяются решением задачи об атоме водорода. Для внешних электронов это величины порядка $(0,1 \div 1) R_y \sim 1 \div 10$ электронВольт. Энергии возбуждения отдельных уровней и их расщепления на 1-2 порядка меньше, это электронВольты и их доли. Внутренние электроны чувствуют притяжение почти неэкранированного ядра, их энергии связи достигают $Z^2 R_y$, т. е. доходят до $\sim 10^5$ электронВольт (0,1 МэВ) для урана.

◇ Энергии связи молекул на 1-3 порядка меньше энергии ионизации атомов. Молекулы с энергией связи меньше 0,025 эВ разрушаются тепловым движением при комнатной температуре.

◇ Энергии связи ядер на 5-6 порядков больше атомных, типично это — МэВы (МегаэлектронВольты) на нуклон (протон или нейтрон).

Для понимания важности эффектов полезно иметь в виду тепловое уширение спектральных линий. Оно возникает из-за эффекта Доплера — сдвига частоты вследствие теплового движения молекул и атомов. Поскольку скорости движения молекул невелики по сравнению со скоростью света, характерное изменение частоты в силу эффекта Доплера можно оценить с помощью нерелятивистской формулы $\omega' \equiv \omega - \Delta\omega = \omega(1 - v/c)$ (здесь v — проекция скорости молекулы на направление наблюдения). Среднее относительное значение сдвига частоты излучения (относительная ширина спектральной линии) определяется из цепочки простых оценок (M

— масса молекулы или атома):

$$\left\langle \frac{\Delta\omega}{\omega} \right\rangle = \left\langle \frac{v}{c} \right\rangle \sim \left\langle \frac{\sqrt{kT/M}}{c} \right\rangle = \sqrt{\frac{kT}{Mc^2}}. \quad (13.1)$$

Для атома водорода ($Mc^2 \approx 10^9$ эВ) при комнатной температуре ($kT \approx 0,025$ эВ) это относительное уширение составляет $5 \cdot 10^{-6}$.

§ 13.1. Атомы

В атоме каждый из электронов движется в поле, создаваемом ядром и всеми другими электронами. Точное решение такой задачи связано с большими вычислительными трудностями даже для сравнительно простых систем типа атома гелия.

13.1.1. Адиабатическое приближение. Электронные конфигурации

В адиабатическом приближении считают, что каждый электрон в отдельности движется в эффективном самосогласованном центральном поле $V(r) = Z^*(r)e^2/r$, создаваемом ядром и остальными электронами, где $Z^*(r)$ — суммарный заряд ядра и электронов, находящихся внутри сферы радиуса r . Отклонение энергии взаимодействия электрона с ядром и остальными электронами от энергии его движения в эффективном самосогласованном поле невелико, и это обуславливает эффективность рассматриваемой ниже картины.

Вблизи ядра наружные электроны не создают поля, и $Z^*(r) \approx Z$. С ростом расстояния поле убывает быстрее кулоновского, в частности, на больших расстояниях от ядра $Z^*(r) \approx 1$ (внешний электрон «видит» однократно заряженный положительный ион), вблизи от ядра $Z^*(r) \approx Z$ (внутренний электрон «видит» только ядро).

При таком подходе отличие поля от кулоновского на расстояниях, сравнимых с размером ядра учитывается просто как еще одна небольшая модификация эффективного заряда $Z^*(r)$ на малых расстояниях. Для ближайших к ядру электронов тяжелых атомов следует учитывать еще модификацию потенциала, эффективно описывающую релятивистские поправки.

Состояния электрона в этом самосогласованном поле характеризуются определенным значением орбитального момента ℓ . Различные состояния с данным ℓ нумеруются главным квантовым числом $n \equiv n_r + \ell + 1$ — по образцу атома водорода, а полный набор составляют: n , ℓ , проекции момента и спина на избранную ось, m и s_z . Поскольку эффективное поле отличается от кулоновского, энергии состояний с данным n и разными ℓ различаются. При заданных n и ℓ состояния остаются вырожденными по значениям m и s_z .

Состояния отдельного электрона обозначают символом $n\ell$, где для ℓ используют буквы s , p , d , f и т. д. (1), а для n — его численное значение. Так, состояние $4f$ обозначает состояние электрона с $n = 4$, $\ell = 3$. Чтобы описать состояние атома, указывают состояния каждого из электронов, причем все состояния с одинаковыми n и ℓ записывают однократно, добавляя в конце «показатель степени» — число таких

электронов, — это и есть запись *электронной конфигурации*. Так, электронная конфигурация $2s^2 2p^4 3s^2 3d$ есть конфигурация 9 электронов: 2 — в состоянии $n = 2$, $\ell = 0$, 4 — в состоянии $n = 2$, $\ell = 1$, 2 — в состоянии $n = 3$, $\ell = 0$, 1 — в состоянии $n = 3$, $\ell = 2$. Все возможные состояния с данным n и различными ℓ (их $2n^2$) образуют *электронную оболочку*.

Как и для атома водорода, с ростом n растет средний радиус электронных орбит, так что оболочки с $n = 1, 2$ — внутренние, а с большими n — внешние.

∇ В рассматриваемом приближении с учетом тождественности электронов для каждой возможной конфигурации электронов коллективную волновую функцию записывают в виде детерминанта из функций, соответствующих одноэлектронным состояниям (12.4б). Возможные спиновые состояния определяются с учетом принципа Паули, каждому набору этих спиновых состояний отвечает своя симметрия пространственных функций (для пары электронов такой пример дает (12.5)). Угловые зависимости даются сферическими гармониками (6.23), а для вычисления радиальных функций находят сначала зависимость эффективного заряда от радиуса $Z(r)$ — *метод Хартри-Фока* (В.А. Фок, 1930). При этом для $Z(r)$ получается сложное интегро-дифференциальное уравнение, форма и решение которого различны для разных электронных конфигураций. Это уравнение обычно решают вариационным методом, подбирая подходящие пробные функции. Пример такого вычисления можно найти в [1] § 69.

Важной чертой ответа, получаемого при таких вычислениях, является то, что состояние с наименьшей энергией получается то, в котором спины электронов с данными $n \ell$ в максимальной степени, допустимой принципом Паули, параллельны. При этом достигается максимальная симметрия спиновой волновой функции, и — соответственно — максимальная асимметрия электронной волновой функции; при этом электроны в среднем расположены «подальше» друг от друга, и (положительная) энергия их кулоновского отталкивания меньше, чем в более симметричных пространственных ситуациях — эффект обменного взаимодействия, разд. 12.1.1. Таким образом, получается первое правило Хунда (разд. 13.1.6): *при данной электронной конфигурации наименьшей энергией обладает состояние с наибольшим возможным значением суммарного спина S* .

Следующее приближение к рассмотренной картине учитывает два основных типа взаимодействий и малые поправки к ним.

- (Кулоновское) взаимодействие электронов друг с другом, зависящее от расстояния между ними (*корреляционные силы*).
- *Спин-орбитальное взаимодействие* — спинового магнитного момента с орбитальным. Обычно это взаимодействие слабее корреляционного. Оно определяет *тонкую структуру* — *fine structure* атомных спектров.
- ◇ *Сверхтонкая структура (hyperfine structure)* атомных спектров обусловлена взаимодействием магнитного момента электрона (орбитального и спинового) с магнитным моментом ядра.
- ◇ *Лэмбовский сдвиг* обусловлен различием во взаимодействии электрона с нулевыми колебаниями электромагнитного поля вакуума в состояниях, которые должны быть вырожденными при учете остальных взаимодействий.

С учетом этих взаимодействий электронная конфигурация не полностью определяет состояние атома. Под действием перечисленных возмущений орбитальные моменты и спины различных электронов могут по-разному сложиться в полный орбитальный L и спиновый S моменты атома ($\mathbf{L} = \sum \ell_i$, $\mathbf{S} = \sum \mathbf{s}_i$), а те в свою очередь — в полный момент атома J ($\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$). Полное описание состояния атома включает и его электронную конфигурацию и значения J , L , S . Стандартное обозначение состояния атома как целого имеет вид $^{2S+1}L_J$. При этом значение L записывается прописной буквой S , P , D , ... в соответствии с обозначениями (1), а для $2S + 1$ и J выписываются их численные значения. Например,

$${}^6H_{15/2} \Rightarrow S = 5/2, L = 5, J = 15/2, \quad {}^3D_2 \Rightarrow S = 1, L = 2, J = 2.$$

Полное же описание включает в себя и эти данные, и описание электронной конфигурации, например, $1s^2 2s^2 2p, {}^2P_{3/2}$.

Таким образом, полный гамильтониан атома можно записать в виде (i — номер электрона)

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} - \sum_i \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \hat{H}_f + \hat{H}_{hf} + \hat{H}_L. \quad (13.2)$$

Здесь слагаемое \hat{H}_f описывает тонкое (спин-орбитальное) взаимодействие, слагаемое \hat{H}_{hf} описывает сверхтонкое взаимодействие, а \hat{H}_L — Лэмбовский сдвиг. Адиабатическое приближение учитывает первые два слагаемых и — усредненно — третье слагаемое, корреляционное взаимодействие отвечает отклонению третьего слагаемого от его усредненного значения.

13.1.2. Корреляционные силы

Корреляционные силы (взаимодействие электронов друг с другом) нарушают сферическую симметрию для отдельного электрона. Используем обсуждавшееся в § 11.1 соответствие $\mathbf{r} \propto \ell$. Тогда зависящую от углов часть этого возмущения мы запишем в виде

$$V_{corr} = \sum \gamma_{ij}(\ell_i \ell_j). \quad (13.3)$$

Если это наибольшее возмущение, его действие приводит к тому, что моменты отдельных электронов складываются в суммарный орбитальный момент атома $\mathbf{L} = \sum \ell_i$. Далее, состояние с определенным значением L соответствует определенной симметрии волновой функции по перестановкам пространственных координат отдельных электронов. В свою очередь, с учетом принципа Паули, это соответствует определенной симметрии спиновой волновой функции коллектива электронов, т. е. определенному значению суммарного спина $\mathbf{S} = \sum \mathbf{s}_i$ (наподобие того, как об этом говорилось при обсуждении состояний пары электронов и обменного взаимодействия в разд. 12.1.1.)

Эта поправка к энергии по порядку величины имеет масштаб характерной энергии в атоме $1 R_y$, но во всех практически известных случаях сюда добавляется маленький численный множитель. Для элементов, начиная с 3-го периода периодической системы этого оказывается достаточно, чтобы изменить порядок заполнения термов (см. разд. 13.1.6).

13.1.3. Спин-орбитальное взаимодействие. Тонкая структура

На электрон, движущийся со скоростью \mathbf{v} в электрическом поле \mathcal{E} , действует магнитное поле $\mathbf{B} = -[\mathbf{v} \times \mathcal{E}]/c$. Поскольку $\mathcal{E} = -(\mathbf{r}/r)d\phi/dr$,

$$\mathbf{B} = -[\mathbf{r} \times \mathbf{v}] \frac{(d\phi/dr)}{2erc} = -\frac{\hbar}{2emcr} (d\phi/dr) \ell.$$

(Появление множителя 2 в знаменателе описывается более аккуратно вычислением, учитывающим неинерциальность системы отсчета, связанной с электроном в магнитном поле).

В итоге энергия взаимодействия спинового магнитного момента i -го электрона с этим полем (спин-орбитальное взаимодействие) есть (напомним, что $V = e\phi$)

$$V_{ls,i} = -\mu_s \mathbf{B} = \frac{\hbar^2}{2m^2 c^2 r_i} V'(r_i) \cdot \ell_i \mathbf{s}_i \Rightarrow \beta_i (\ell_i \mathbf{s}_i), \quad (13.4)$$

$$\beta_i \sim \frac{V^*(r_i)}{r_i^2} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \sim \frac{e^2 Z^*(r_i)}{r_i^3} \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 = Z^*(r) \left(\frac{a_B}{r} \right)^3 \alpha^2 R_y.$$

Получившееся выражение следует просуммировать по всем электронам и усреднить по объему, $V_{LS} = \langle \sum V_{ls,i} \rangle$. Усреднение по электронному состоянию атома с данными значениями суммарных момента импульса L и спина S дает

$$V_{LS} = C(\mathbf{LS}), \quad C \sim \langle \sum \beta_i \rangle. \quad (13.5)$$

Оценим теперь величину коэффициента C . Из-за множителя $1/r^3$ основной вклад при усреднении дает область малых r , где волновая функция такова же, как и у водородоподобного атома с зарядом ядра Ze (см. стр. 126), при этом $Z^* = Z$. Вспомним теперь, что для такого атома $e^2 Z/r \sim Z^2 \cdot R_y$ и $r \sim a_B(Z) = \hbar/(Zm\alpha)$ (7.14). В итоге в основной области $r \lesssim a_B/Z$ мы имеем $\beta_i \sim Z^4 \alpha^2 R_y$. Однако для внешних электронов эффективный заряд $Z^* = 1$, и вероятность для такого электрона попасть в сферу небольшого радиуса $r \lesssim a_B/Z$ составляет $1/Z^2$. В итоге получается оценка

$$C \sim (Z\alpha)^2 R_y. \quad (13.6)$$

Если электронная конфигурация такова, что имеется всего одна незаполненная оболочка, и эта оболочка заполнена менее, чем наполовину, то $C > 0$; в противоположном случае $C < 0$ [1].

Итак, энергия атома начинает зависеть от его полного спина и от взаимной ориентации момента импульса и спина. Эта зависимость называют *тонкой структурой* (*fine structure*). Напомним, что (ср. § 11.1)

$$\langle \mathbf{LS} \rangle \equiv \langle (\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2) \rangle = \frac{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)}{2}. \quad (13.7)$$

Поэтому расщепление уровней тонкой структуры есть $CJ(J+1)/2$ с характерной энергией (13.6), а расстояние между ними $\Delta E_{J,J-1} = CJ$ (*правило интервалов Ланде*).

Тонкую структуру можно наблюдать, например, в спектре поглощения света. Обозначим через E_{nL} энергию основного состояния атома без учета тонкой структуры и через $E_{n'n'L'}$ определенную в том же приближении энергию атома, в котором электрон с «внутренней» орбиты n' переместился на внешнюю орбиту n так, что момент импульса атома стал L' . Тогда в спектре поглощения будут наблюдаться полосы, отвечающие частотам

$$\omega = \frac{E_{n'L'} - E_{nL}}{\hbar} + \frac{B'[J'(J'+1) - L'(L'+1) - S'(S'+1)] - B[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]}{2\hbar}.$$

Здесь штрихованные величины отвечают состояниям возбужденного атома, которые определяются по приведенной выше схеме.

∇ Для тяжелого атома ($Z \gg 1$) спин-орбитальное взаимодействие (13.5) может оказаться сильнее корреляционного ($B \sim 1$). Если бы это неравенство между взаимодействиями стало сильным, то первая поправка соответствовала бы тому, что сначала формируются полные моменты отдельных электронов $\mathbf{j}_a \equiv \ell_a \mathbf{s}_a$, а затем уже возмущение V_{corr} дает полный момент $\mathbf{J} = \sum \mathbf{j}_a$. Этот случай называют *случаем jj -связи*. Однако, случай чистой jj -связи для элементов таблицы Менделеева не реализуется, и для тяжелых атомов приходится иметь дело с трудно вычислимым случаем смешанной jj -и LS -связи.

13.1.4. Тонкая структура уровней атома водорода

Тонкая структура уровней атома водорода имеет свои характерные черты. Чтобы изучить ее, заметим, что спин-орбитальное взаимодействие — эффект второго порядка по отношению v/c . Исследование релятивистского уравнения для электрона — уравнения Дирака — позволяет записать гамильтониан атома водорода с точностью до $(v/c)^2$ в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_r + \hat{V}_{fs} + \hat{V}_D, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}, \quad (13.8)$$

$$\hat{V}_r = -\frac{(\hat{\mathbf{p}}^2)}{8m^2c^3}, \quad \hat{V}_{fs} = \frac{1}{2} \left(\frac{a_B}{r}\right)^3 \alpha^2 R_y (\ell \mathbf{s}), \quad \hat{V}_D = \frac{\pi}{2} \alpha^2 R_y a_B^3 \delta(\mathbf{r}).$$

Мы рассматриваем слагаемые \hat{V}_i как возмущения. Слагаемое \hat{V}_r — обычная поправка в разложении кинетической энергии $\epsilon = \sqrt{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2} - mc^2$ по (v/c) (7.21). Слагаемое \hat{V}_{fs} — обсуждавшееся выше спин-орбитальное взаимодействие с аккуратно вычисленным коэффициентом. Для слагаемого \hat{V}_D (его обнаружил *Дарвин*) простое нерелятивистское объяснение не известно.

Поправка к энергии уровней, обусловленная слагаемым \hat{V}_r , вычислена в (7.21б):

$$\Delta E_r = -\frac{R_y \alpha^2}{n^3} \left(\frac{1}{\ell + 1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (13.9a)$$

Эта поправка обеспечивает небольшое разрушение вырождения по ℓ при фиксированном n .

Дарвиновская поправка к энергии:

$$\Delta E_D = \langle njl | \hat{V}_D | njl \rangle = \frac{\pi}{2} R_y \alpha^2 a_B^3 \langle njl | \delta(\mathbf{r}) | njl \rangle = \frac{\pi}{2} R_y \alpha^2 a_B^3 |\psi_{n,\ell m}(0)|^2 \delta_{\ell 0}.$$

Эта величина содержит квадрат волновой функции при $\mathbf{r} = 0$, который отличен от нуля только при $\ell = 0$ (напомним, что при малых r радиальная волновая функция убывает как r^ℓ (7.7)). При этом $\psi_{n,\ell=0} = R_{n,\ell=0}/\sqrt{4\pi}$. Используя (7.17в), мы получаем

$$a_B^3 |\psi_{n0}|^2(0) = \frac{1}{\pi n^3} \delta_{\ell 0} \Rightarrow \Delta E_D = \frac{R_y \alpha^2}{2n^3} \delta_{\ell 0}. \quad (13.9б)$$

Спин-орбитальная поправка к энергии:

$$\begin{aligned} \Delta E_{js} &= \frac{\alpha^2}{2} R_y \left\langle njl \left| \frac{(\ell s) a_B^3}{r^3} \right| njl \right\rangle = \\ &= \frac{\alpha^2}{2} R_y \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - 3/4}{2} \left\langle njl \left| \frac{a_B^3}{r^3} \right| njl \right\rangle. \end{aligned}$$

При $\ell = 0$ среднее значение $\langle |(\ell s)| \rangle$ обращается в нуль, т. е. равен нулю и весь спин-орбитальный вклад. Коэффициент же $\langle |1/r^3| \rangle$ не расходится только при $\ell \neq 0$ (вспомните (7.7)). Это среднее вычисляется с помощью выражения для радиальных волновых функций атома водорода (7.17):

$$\begin{aligned} \left\langle njl \left| \frac{a_B^3}{r^3} \right| njl \right\rangle (1 - \delta_{\ell 0}) &= \frac{1}{n^3 (\ell + 1/2) \ell (\ell + 1)} (1 - \delta_{\ell 0}) \Rightarrow \\ \Delta E_{js} &= \frac{R_y \alpha^2}{4n^3} \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - 3/4}{(\ell + 1/2) \ell (\ell + 1)} (1 - \delta_{\ell 0}) \end{aligned} \quad (13.9в)$$

В приложении 17.2.7 формулы (13.9б), (13.9в) получены операторным методом без обращения к выражениям для волновых функций атома водорода.

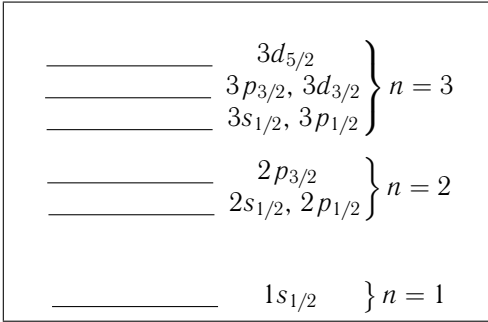


Рис. 13.1. Тонкая структура атома водорода

Полная поправка второго порядка по $(v/c) \sim \alpha$ к энергии уровня атома водорода складывается из найденных вкладов (13.9): $\Delta E = \Delta E_r + \Delta E_{js} + \Delta E_D$. Приводя подобные члены для каждого из двух возможных значений $j = \ell + 1/2$ и $j = \ell - 1/2$, мы обнаруживаем, что общее выражение для энергии уровня с учетом этой поправки сохраняет двукратное вырождение по ориентации спина при заданном значении полного момента j :

$$E_{nj\ell} = -\frac{R_y}{n^2} - \frac{R_y \alpha^2}{n^3} \left(\frac{1}{j + 1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (13.10)$$

На рис. 13.1 изображена получившаяся схема уровней тонкой структуры.

Обнаруженное двукратное вырождение отсутствует у атомов с несколькими электронами, где уже состояния невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 при разных ℓ и одинаковом n имеют разные энергии. Для таких атомов релятивистское слагаемое \hat{V}_r и Дарвиновский член \hat{V}_D добавляют лишь ничтожные поправки ($\sim \alpha^2$) к уже имеющемуся расщеплению термов, вызванному отклонением эффективного потенциала от закона $1/r$, поэтому для таких атомов эти поправки можно не учитывать. По той же причине для многоэлектронных атомов обычно не изучается зависимость среднего $\langle 1/r^3 \rangle$ от ℓ .

Лэмбовский сдвиг. Вырождение, показанное на рис. 13.1, снимается очень слабым Лэмбовским расщеплением, которое обусловлено взаимодействием электрона с вакуумными флуктуациями электромагнитного поля и «виртуальным» (на очень короткое время, допускаемое соотношением неопределенностей) рождением электрон-позитронных пар. Точный расчет, проводимый методами квантовой электродинамики, показывает, что эти эффекты заметно сдвигают только энергии состояний с $\ell = 0$ (s -состояния), для остальных состояний сдвиги энергий очень малы. Энергия уровня $ns_{1/2}$ (13.10) увеличивается на величину

$$\delta E_{n,\ell=0}^L = \frac{16\alpha^3}{3\pi n^3} \left[\ln \frac{1}{\alpha} + R_n \right]. \quad (13.11)$$

Число $R_n \sim 1$ вычисляется отдельно. Сдвиг уровней с $\ell \neq 0$ значительно меньше, помимо общей зависимости $16\alpha^3/(3\pi n^3)$, этот сдвиг зависит от ℓ и j , но не содержит большого усиливающего слагаемого $\ln(1/\alpha)$. В частности, для уровня $2s_{1/2}$ величина $R_2 = -1,089$, а вычисленное расстояние между уровнями $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ составляет $1057,91 \pm 0,01$ МГц, что прекрасно согласуется с измеренным значением $1057,90 \pm 0,06$ МГц.

Вычисление величины Лэмбовского сдвига в 1947 г. стало рубежом, ознаменовавшим построение первой последовательной современной теории квантованных полей — квантовой электродинамики.

13.1.5. Малые поправки

Сверхтонкая структура (hyperfine structure). Сверхтонкая структура термов возникает из-за взаимодействия магнитного момента электрона (орбитального и спинного) с магнитным моментом ядра. По порядку величины энергия этого взаимодействия составляет

$$E_{hf} \sim \left\langle \frac{\mu_e \mu_A}{r^3} \right\rangle \sim Z \frac{e\hbar}{2m_e c} \cdot \frac{e\hbar}{2M_p c} \cdot \frac{1}{a_B^3} \sim Z\alpha^2 \frac{m_e}{M_p} R_y. \quad (13.12)$$

Здесь M_p — масса протона (магнитный момент ядра складывается, грубо говоря, из магнитных моментов составляющих его протонов и нейтронов), а множитель Z возник из суммирования по всем электронам атома. В соответствии с оценкой (13.1)

для водорода это расщепление при комнатной температуре «тонет» в тепловом уширении и наблюдается лишь при достаточно низких температурах. Для более тяжелых атомов условия наблюдения изотопического сдвига более благоприятны.

В принципе, высшие моменты ядра (квадрупольный, октупольный) также взаимодействуют с магнитным моментом электрона, но эти эффекты обычно исчезающе малы (подавление степенями m_e/M_A).

Изотопический сдвиг. *Изотопами* называются ядра с одинаковым зарядом ядра (номером в периодической системе), но с разными массами. Для атомов, ядра которых — разные изотопы одного элемента, уровни немного различаются по двум причинам.

1. В описание атома входит приведенная масса электрона, которую в задаче двух тел (атом водорода) можно записать с хорошей точностью как $m_e M_A / (m_e + M_A) \approx m_e (1 - m_e/M_A)$ (7.1а), соответственно при переходе от водорода к дейтерию ($M_A = 2M_p$) энергии всех состояний меняются в $1 - \delta$ раз, где

$$\delta = 1 - [(1 - m_e/M_A)] / (1 - m_e/M_p) \approx m_e (1/M_A - 1/M_p).$$

Для многоэлектронного атома это простое видоизменение не проходит, но по порядку величины изменение энергий уровней определяется подобным соотношением $\delta_M = m_e \Delta M_A / M_A^2$.

2. Ядра разных изотопов имеют разные размеры. В хорошем приближении можно считать, что электрон просто не может проникать на расстояния, меньшие радиуса ядра r_A . Т.к. возникающий эффект очевидно мал, здесь можно использовать теорию возмущений, считая за возмущение разность между истинным потенциалом и чисто кулоновским. Это возмущение составляет $V_i = Ze^2/r$ при $r \leq r_A$ и обращается в ноль на больших расстояниях. По обычным правилам теории возмущений поправка к энергии состояния с квантовыми числами n, ℓ, m составляет $\delta E = \int \psi_{n\ell m}^* V_i \psi_{n\ell m} dV$. Последний интеграл берется фактически только по размерам ядра, значительно меньшим характерного радиуса электронной орбиты a_B/Z . Поэтому достаточно учесть только значения волновых функций $\psi_{n\ell m}$ только при $r = 0$. В соответствии с (7.17) при этом остаются только вклады с $\ell = 0$ (s -волна) и множитель $|\psi_{n00}|^2(r = 0)$. Если бы мы имели дело с водородоподобным атомом, последняя величина составляла бы (см. (7.17в)) $Z^3/(n^3 a_B^3)$. Однако, с ростом расстояния эффективный заряд уменьшается, что дает значительно меньшее значение $|\psi_{100}|^2(r = 0) \sim Z/(a_B^3)$ (см. [1] § 71) Таким образом, поправка к энергии уровня $|1, 0, 0\rangle$, обусловленная конечным размером ядра, составляет $\delta E_A = (Ze^2/r_A)(Zr_A^3)/(a_B^3) \approx (Zr_A/a_B)^2 R_y$. Таким образом, появляется вклад в изотопический сдвиг, обусловленный различием размеров ядра для изотопов:

$$\Delta \delta E_A \approx (Z^2 \delta(r_A^2)/(a_B^2) R_y).$$

13.1.6. Периодическая система элементов

Теперь мы готовы к тому, чтобы понять природу периодической зависимости химических свойств элемента от его атомного номера — периодической таблицы Менделеева.

Начнем с описания основного состояния некоторого атома. Электроны заполняют состояния с наименьшими возможными энергиями, допускаемыми принципом Паули. При описании их конфигурации мы используем полученные в § 7.1 выводы. При заданном n энергия состояния растет с ростом ℓ . Наоборот, при заданном значении ℓ энергия состояния растет с ростом n .

Пусть теперь к первоначально «голому» ядру по одному добавляются электроны. Первый из них займет самое низкое состояние $1s$. Следующий попадет в то же состояние, но спины этих электронов противоположно направлены так, что их сумма равна нулю; первая оболочка заполнена, это $1s^2$. Если $Z = 2$, то этим все и кончается, мы имеем атом инертного газа He .

Следующие 2 электрона попадают в состояния $2s$, давая нулевой вклад в суммарный спин, это $2s^2$. Далее заполняется оболочка $2p$, которая может содержать до $6 = 2(2\ell + 1)$ электронов. В последнем случае все проекции момента и спина встречаются по одному разу, т. е. суммарные момент и спин этих электронов равны нулю. Этим заканчивается заполнение 2-й оболочки — 8 электронов. Если $Z = 10$, то этим все и кончается, мы имеем атом инертного газа Ne .

Теперь заполняется 3-я оболочка. Опять сначала заполняются состояния $3s^2$, а затем электроны (не более 6) садятся на уровень $3p$. При $Z = 18$ мы имеем атом инертного газа Ar с электронной конфигурацией $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$.

Далее следовало бы ожидать заполнения состояний $3d$. Но оказывается, что энергия $4s$ -состояний меньше, и заполняются сначала $4s$ -состояния. Только после этого заполняются $3d$ -состояния, а уж затем $4p$. Если $Z = 36$ (инертный газ Kr), то этим все и кончается.

Этот сбой в заполнении электронных оболочек происходит из-за того, что волновые функции состояний с малыми моментами (s и p) подходят ближе к ядру и больше чувствуют область сильного потенциала. В результате энергия этих оболочек оказывается равной или меньшей, чем у оболочек с меньшими n , но большими ℓ . Так, оболочка $4s$ заполняется раньше, чем $3d$, а оболочка $5s$ одновременно с $4d$. Оболочки ($6s, 4f, 5d$) и ($7s, 5f, 6d$) заполняются в указанной последовательности.

Понятно, что для инертных газов $L = S = J = 0$. А как определяются эти величины для незаполненных оболочек? Ответ на этот вопрос дает эмпирическое **правило Хунда**:

наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным при данной электронной конфигурации значением S и наибольшим (возможным при этом S) значением L .

Физический смысл этого правила следующий: чем ближе наборы квантовых чисел различных электронов данной оболочки, тем сильнее принцип Паули препятствует им находиться в одних и тех же точках пространства и тем меньше энергия их взаимного отталкивания (выгодно, чтобы пространственная волновая функция была максимально антисимметричной, при этом спиновая функция должна быть максимально симметричной, что и дает наибольшее значение S).

Что касается значения J , то оно определяется знаком константы LS взаимодействия β . При $\beta > 0$ наиминимум является состояние с наибольшим возможным

значением $J = L + S$, при $\beta > 0$ наимизшим является состояние с наименьшим возможным значением $J = |L - S|$.

Пример — оболочка $3p^3$. Возможные состояния $|m, s_z\rangle$ с $m = \pm 1, 0$ и $s_z = \pm 1/2$. Наибольшее значение s_z достигается в конфигурации $|1, 1/2\rangle, |0, 1/2\rangle, |-1, 1/2\rangle$. Суммарное значение $S_z = 3/2$, а $L = 0$. Это максимальное значение S_z . Соответственно, в основном состоянии спектральный терм атома есть $^4S_{3/2}$.

Химические свойства атома определяются наименее сильно связанными с ядром валентными электронами внешней оболочки, т. е. числом занятых и свободных мест в этой оболочке и энергией связи, которая нужна для удаления одного из этих электронов из атома.

При описанной выше инверсии заполнения ($4s, 3d, 4p$) волновые функции состояний с большим n простираются дальше и во внешнюю область атома. Именно они оказываются теми внешними электронами, которые определяют химические свойства. В результате для любого атома эти свойства определяются (в основном) s - и p -электронами внешней оболочки, а элементы с разным количеством электронов в d -оболочке обладают близкими свойствами (переходные металлы). Последнее утверждение еще точнее для f -оболочек, которые порождают семейства элементов близнецов — редкие земли (лантаноиды) и актиноиды.

Повторяемость структуры наружных оболочек при росте Z и обуславливает периодичность в зависимости свойств элементов от их атомного номера (и веса). В частности, элементы, у которых в наружной оболочке находится только один электрон, — щелочные металлы (кроме водорода, $n = 1$), легко отдающие этот электрон в химических связях. Стоящие перед ними в таблице элементы с полностью заполненной верхней оболочкой — инертные газы, не проявляющие никакого интереса к химическому обмену электронами. Элементы, стоящие перед инертными газами, — галогены, у которых во внешней p -оболочке имеется по одному свободному состоянию, и они проявляют сильную химическую активность в стремлении заполнить его чужим электроном.

13.1.7. Атом в магнитном поле

Уровни энергии уединенного атома вырождены по направлениям. В атоме с LS связью кратность вырождения составляет $2J + 1$. В однородном магнитном поле $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ это вырождение снимается за счет магнитного взаимодействия (10.1), (10.4) (*эффект Зеемана*). Однако, в силу слабости LS взаимодействия (13.6) характер эффекта зависит от величины магнитного поля, т. е. от соотношения между величиной тонкого расщепления и характерной энергией электрона в магнитном поле $\mu_B B$. Соответствующее критическое поле (когда эти энергии сравниваются) составляет типично $B_c \sim 10^4$ Гс.

• В слабом магнитном поле $B \ll B_c$ магнитное взаимодействие можно рассматривать как малую поправку к описанию системы с LS взаимодействием, когда полный орбитальный момент L и полный спин S системы складываются в полный момент J — *аномальный эффект Зеемана*. В этом случае сдвиг энергии уровня с

проекцией момента на направление поля, равной M , описывается соотношением

$$\Delta E = \mu_B B \langle JM | \hat{V} | JM \rangle \quad (\hat{V} = \hat{L} + 2\hat{S}).$$

Входящее сюда среднее вычисляется с помощью (11.9):

$$\langle JM | V_z | JM \rangle = \frac{\langle JM | J_z | M, J \rangle \langle JM | (\mathbf{JV}) | JM \rangle}{J(J+1)},$$

где $(\mathbf{JV}) = \mathbf{J}^2 + (\mathbf{JS})$. Напомним, что $\mathbf{L}^2 \equiv (\mathbf{J} - \mathbf{S})^2 \equiv \mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - 2(\mathbf{JS})$. Поэтому $(\mathbf{JV}) = \mathbf{J}^2 + (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2)/2$. Вычисляя среднее от этой суммы операторов, найдем сдвиг уровней

$$\Delta E = g\mu_B MB, \quad g = \frac{3J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (13.13)$$

Коэффициент g называют *множителем Ланде*.

$$p_{3/2} \begin{cases} \text{-----} & m_j = +3/2, \\ \text{-----} & m_j = +1/2, \\ \text{-----} & m_j = -1/2, \\ \text{-----} & m_j = -3/2, \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{-----} \quad m_\ell = +1, \quad m_s = +1/2 \\ \text{-----} \quad m_\ell = 0, \quad m_s = +1/2 \\ \text{=====} \quad m_\ell = \pm 1, \quad m_s = \mp 1/2 \\ \text{-----} \quad m_\ell = 0, \quad m_s = -1/2 \\ \text{-----} \quad m_\ell = -1, \quad m_s = -1/2 \end{array}$$

Аномальный эффект Зеемана

Нормальный эффект Зеемана

Рис. 13.2. Расщепление термов для одного p -электрона.

• В сильном магнитном поле $B \gg B_c$ ($\sim C$) (13.5), напротив, основным является уже магнитное взаимодействие, а LS взаимодействие оказывается возмущением. В этом случае в качестве невозмущенных состояний следует использовать собственные состояния операторов $\hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$ (без формирования полного момента J). При этом (*нормальный эффект Зеемана*)

$$\Delta E = \mu_B \langle L, L_z; S, S_z | \hat{V} + C\hat{L}\hat{S} | L, L_z; S, S_z \rangle = \mu_B(L_z + 2S_z) + CL_zS_z. \quad (13.14)$$

Обычно слагаемым CL_zS_z пренебрегают из-за его малости. В этом приближении некоторые термы вырождены (одно и то же значение $L_z + 2S_z$ может достигаться при разных L_z и S_z). Обычно это вырождение снимается LS -взаимодействием CL_zS_z , и величина этого расщепления — того же порядка, что и расстояние между уровнями тонкой структуры в отсутствие магнитного поля. Так обстоит дело, например, для случая $L = 1, S = 1$, когда двукратно вырождены в главном приближении термы, отвечающие $[(L_z = 1, S_z = 0) \text{ и } (L_z = -1, S_z = 1)]$ и $[(L_z = -1, S_z = 0) \text{ и } (L_z = 1, S_z = -1)]$, и спин-орбитальное взаимодействие приводит к заметному расщеплению термов.

Оба случая, слабого и сильного поля, для случая $L = 1, S = 1/2$ демонстрирует рис. 13.2. Обратите внимание, что масштаб расщепления на правом рисунке много

больше, чем на левом. Кроме того, все термы тонкой структуры и магнитные термы слева лежат выше невозмущенного терма (мы выбрали $C > 0$). На правом рисунке магнитные термы расположены симметрично относительно невозмущенного терма. В этом примере случайным образом спин-орбитальное взаимодействие не расщепляет вырожденный терм (двойная черточка), терм расщепляется на два только из-за наличия аномального магнитного момента у электрона. В соответствии с (10.5) это расщепление составляет примерно одну тысячную от расстояния до следующего магнитного уровня.

- В промежуточном случае $B \sim B_c$ следует рассматривать оба взаимодействия, и спин-орбитальное и магнитное, одновременно. В этом случае мы имеем дело с *эффектом Пашена-Бака*.

- В очень сильном поле или для высоко возбужденных состояний атома величина $\delta_B = |\langle \mu_B V \rangle / E_n|$ (10.10) перестает быть малой, в этом случае необходимо учитывать оба слагаемых, содержащих магнитное поле в (10.9) — и линейное по полю, и квадратичное.

■ **Применения — для случая слабого поля.** Магнитное поле, действующее на электроны атомов и ионов, включенных в молекулы или кристаллы, отличается от измеряемого поля (*отличие действующего поля от среднего*) по двум причинам, во-первых, из-за частичного экранирования внешнего поля окружающими ионами и атомами и во-вторых, из-за пространственного перераспределения соседних электронов во внешнем поле (диамагнитный эффект). Поэтому можно говорить об *эффективном значении фактора Ланде в зависимости от положения атома или иона в том или ином соединении — характерной метки этого атома или иона в разных молекулах*. Взаимодействие магнитного поля со спином ядра также приводит к расщеплению спектральных линий, которое в тысячи раз меньше атомного — в силу малости ядерного магнетона. В то же время величина спина ядра и его гиромагнитное отношение сильно меняются от ядра к ядру и даже от изотопа к изотопу. Использование этих особенностей магнитного расщепления уровней является мощным методом изучения вещества.

К сожалению, прямые спектральные измерения требуют рассматривать прозрачный объект (обычно это газ). Кроме того, в присутствии теплового уширения линий точность таких измерений обычно недостаточно высока. От этих трудностей свободны методы **электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) и ядерного магнитного резонанса (ЯМР)**. В обоих случаях рассматриваемую систему помещают в магнитное поле. Через нее пропускают в направлении, перпендикулярном полю, электромагнитную волну с частотой $\omega \approx g\mu_B B/\hbar$ и изучают зависимость коэффициента поглощения от ω или зависимость намагниченности от времени при разных ω . Поглощение максимально тогда, когда поле волны входит в резонанс с переходами между магнитными уровнями системы, т. е. частота ω совпадает с энергией магнитных переходов (деленной на \hbar), вне зависимости от скорости теплового движения молекулы. Положение резонанса дает величину эффективного фактора Ланде (который независимо оценивается по мультиплетности магнитного расщепления). Важную информацию удается получить и по форме линии. (Эта форма обусловлена особенностями затухания, которое в свою очередь определяется свойствами взаимодействия изучаемого объекта с окружением.) Следует заметить, что типичные измерения ЭПР

требуют частот в десятки и сотни мегагерц, в то время как при использовании ЯМР достаточно работать с частотами в десятки килогерц.

В экспериментах ЭПР рассматриваются резонансы, связанные с электронными магнитными переходами. Эти спектры позволяют получить детальные сведения о молекулярном составе вещества и о кинетике химических реакций (о появлении в процессе реакции тех или иных промежуточных ионов).

В экспериментах ЯМР приходится использовать значительно более сильное магнитное поле. Полученные спектры дают сведения о наличии в образце тех или иных ядер и изотопов. Использование магнитного поля, меняющегося вдоль образца, позволяет наблюдать фактически пространственное распределение плотности ядер определенного сорта, что является основой ЯМР-томографии.

§ 13.2. Молекулы

При описании молекул малость массы электрона m по сравнению с массой ядра M обеспечивает хорошую точность *адиабатического приближения*, в котором считается, что электроны движутся значительно быстрее ядер, так что электронная конфигурация молекулы «подстраивается» под мгновенное положение ядер. Погрешность этого приближения определяется *очень малым параметром* — отношением массы электрона к приведенной массе ядер в молекуле (определяющей их относительное движение)

$$\gamma = m/M \lesssim 10^{-4}. \quad (13.15)$$

Подчеркнем, что именно электроны определяют химическое взаимодействие атомов, склеивающее их в молекулы. Мы обсудим кратко стандартную классификацию типов связей атомов в молекулах — *химических связей*. Обычно в природе реализуются не эти идеальные случаи, а некоторые их комбинации.

13.2.1. Типы связей

В случае *ионной связи* хорошо работает приближение, в котором один из атомов «отдает» свои электроны незаполненной внешней оболочке другому так, что они образуют ионы. Эти ионы кулоновски взаимодействуют друг с другом (притягиваются). Это притяжение, очевидно, не имеет другой ориентации в пространстве, помимо направления, задаваемого ориентациями ядер. Такой тип связи реализуется в большинстве неорганических соединений.

В случае *ковалентной связи* хорошо работает приближение, в котором электроны незаполненных оболочек «обобществляются», создавая коллектив с определенным значением суммарного момента и спина. Направление суммарного момента задает дополнительную ориентацию в пространстве (в дополнении к направлению, задаваемому положениями ядер), а его величина — специальный тип распределения электронной плотности, определяемый угловой зависимостью сферических гармоник. Здесь существует та же спецификация состояний по величине суммарного момента, как и в случае атома, только используются греческие буквы, так, состояния с $j = 0$ и $j = 1$ называют соответственно σ и π состояниями. Такой тип связи

реализуется во многих неорганических соединениях и в большинстве органических соединений.

В обоих этих случаях энергии связи молекулы ($\lesssim 1$ эВ) отличаются от энергии связи электрона в атоме меньше, чем на порядок из-за отличия поля от кулоновского и из-за относительно большого межатомного расстояния.

В некоторых органических соединениях реализуется еще *водородная связь*, когда электрически нейтральные молекулярные комплексы взаимодействуют, создавая друг в друге электрические диполи, которые и притягиваются друг к другу. Соответствующие энергии связи оказываются не слишком малыми ($\sim 0,01 \div 0,1$) эВ только для случаев, когда во взаимодействии участвуют самые легкие атомы — атомы водорода.

Уравнение Шредингера для стационарных состояний молекулы имеет вид

$$\left(\sum_{i=1}^n \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{j=1}^N \frac{\hat{p}_j^2}{2M_j} + V \right) \psi = E\psi. \quad (13.16)$$

Здесь n — число электронов, N — число ядер, V — суммарная энергия взаимодействия электронов с ядрами и между собой.

Выделим теперь поступательное движение молекулы как целого и займемся описанием молекулы самой по себе.

В первом адиабатическом приближении мы пренебрегаем кинетической энергией ядер. При этом ядерные j -координаты входят в уравнение только как параметры потенциальной энергии V . Соответственно, мы ищем полную волновую функцию в виде

$$\psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j) = \phi_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}_i) \chi(\mathbf{R}_j), \quad (13.17)$$

где электронная часть удовлетворяет уравнению

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \Delta_i + V(r_i; R_j) \right) \phi_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}_i) = U(\mathbf{R}_j) \phi_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}_i). \quad (13.18)$$

При заданных положениях ядер R_j величина $U(\mathbf{R}_j)$ получается как собственное значение энергии в уравнении (13.18). Если теперь мы подставим в (13.16) волновую функцию в виде (13.17) и учтем (13.18), то для ядерной части волновой функции $\chi(\mathbf{R}_j)$ получается уравнение

$$\left(-\sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_j} \Delta_j + U(\mathbf{R}_j) \right) \chi(\mathbf{R}_j) = E \chi(\mathbf{R}_j). \quad (13.19)$$

13.2.2. Колебательные и вращательные уровни

Существование молекулы как связанной системы предполагает, что $U(\mathbf{R}_j)$ имеет минимум, определяющий равновесную конфигурацию ядер. Вблизи этого минимума

в движении ядер выделяются вращение равновесной ядерной конфигурации как целого (т. е. вращение всей молекулы) и внутренние колебания ядер относительно их равновесных положений. Оценим энергии этих движений для молекул, содержащих не слишком много атомов, имея в виду, что при характерном размере молекулы a энергия U и ее характерные изменения на масштабе a определяются масштабом локализации.

Колебательные уровни. Для небольших отклонений от положений равновесия \mathbf{R}_j разложение «потенциальной энергии» по отклонению начинается с квадратичных членов, и масштаб этой зависимости определяется размером a . Поэтому можно записать

$$\Delta U(\mathbf{R}_j) \sim E_e \left(\frac{\Delta \mathbf{R}_j}{a} \right)^2 = \frac{k_{eff}}{2} (\Delta \mathbf{R}_j)^2, \quad k_{eff} \approx \frac{\hbar^2}{ma^4}.$$

Тогда энергии нормальных колебаний ядерной конфигурации

$$E_{osc} \sim \hbar \sqrt{\frac{k_{eff}}{M}} \sim \frac{\hbar^2}{\sqrt{mMa^2}} \sim \sqrt{\frac{m}{M}} E_e = \sqrt{\gamma} E_e. \quad (13.20)$$

Вращательные уровни. Характерная энергия углового движения получается из (13.19), если считать все $R_j \sim a$:

$$E_{rot} \sim \frac{\hbar^2}{Ma^2} \sim \frac{m}{M} E_e = \gamma E_e. \quad (13.21)$$

Иллюстрация. Проиллюстрируем наши оценки, рассмотрев двухатомную молекулу, в которой каждый из атомов находится в основном состоянии и взаимодействие состоит в кулоновском притяжении ионов на расстояниях a_M , масштаб которого задается соотношением вида (7.14) с заменой $m \rightarrow M$ («ионный борковский радиус») и отталкивания электронных облаков, которое определяется распределением их плотности в атомах, т. е. обычным Боровским радиусом (по определению $a_B = a_M/\gamma$). Чтобы решалось, мы аппроксимируем это отталкивание выражением $e^2 a_B/r^2 \equiv (1/\gamma)e^2 a_M/r^2$. Более правдоподобной была бы зависимость $\propto r^{-6}$ (Ван дер Ваальс), в этом случае качественный результат имеет тот же вид, но вычисления значительно более громоздкие (задача 8.10 б).

Итак, найдем уровни энергии в системе с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} - \frac{e^2}{r} \left(1 - \frac{a_M}{\gamma r} \right). \quad (13.22)$$

Это — стандартная задача о движении в центрально-симметричном поле. Здесь можно выполнить разделение переменных так, что волновая функция имеет стандартный вид $\psi = R_\ell(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ (7.3) и ее радиальная часть удовлетворяет радиальному уравнению Шредингера с эффективным потенциалом

$$\begin{aligned} U_{eff} &= -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)/2M + a_M/\gamma}{r^2} \equiv \\ &\equiv 2R_y(M) \left[-\frac{a_M}{r} + \left(\ell(\ell+1) + \frac{1}{\gamma} \right) \frac{a_M^2}{r^2} \right]. \end{aligned}$$

Здесь через $R_y(M) = R_y/\gamma$ обозначена характерная энергия системы, полученная из Ридберга R_y (13.15) заменой $m \rightarrow M$.

Получившееся уравнение для радиальной волновой функции совпадает с уравнением (7.15) для радиальной волновой функции кулоновской задачи с заменой величины ℓ на новую величину ℓ' , определяемую из уравнения

$$\ell'(\ell' + 1) = \ell(\ell + 1) + \frac{1}{\gamma} \Rightarrow \ell' = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{\gamma} + \ell(\ell + 1) + \frac{1}{4}}.$$

Соответственно, уровни энергии определяются соотношением (7.19) с заменой $\ell \rightarrow \ell'$:

$$E_{n_r, \ell} = -\frac{R_y(M)}{(n_r + \ell' + 1)^2}. \quad (13.23)$$

Учет малости γ позволяет последовательно выполнить разложения $\ell' = -1/2 + \sqrt{1/\gamma} (1 + (\gamma/2)(\ell(\ell + 1) + 1/4))$ и

$$\begin{aligned} \frac{1}{(n_r + 1 + \ell')^2} &= \left(\frac{\sqrt{\gamma}}{(n_r + \frac{1}{2})\sqrt{\gamma} + 1 + (\gamma/2)(\ell(\ell + 1) + 1/4)} \right)^2 = \\ &= \gamma \left(1 - 2\sqrt{\gamma}(n_r + \frac{1}{2}) - \gamma(\ell(\ell + 1) + 1/4) \right). \end{aligned}$$

Учитывая еще, что $R_y(M) = R_y/\gamma$, получаем окончательно

$$E_{n_r, \ell} = -R_y(1 - \gamma/4) + 2\sqrt{\gamma}R_y(n_r + \frac{1}{2}) + \gamma R_y \ell(\ell + 1). \quad (13.24)$$

Первое слагаемое отвечает началу отсчета энергии. Второе слагаемое $2\sqrt{\gamma}R_y(n_r + \frac{1}{2})$ описывает такую же систему уровней, как у гармонического осциллятора с частотой $\omega = 2\sqrt{\gamma}R_y/\hbar$ — это *колебательные уровни* радиального движения. Третье слагаемое $\gamma R_y \ell(\ell + 1)$ описывает систему вращательных уровней сферического волчка с моментом инерции $I = \hbar^2/(2\gamma R_y)$ это — *вращательные уровни*. Легко видеть, что для этих уровней реализуются оценки (13.20) и (13.21).

◆ Поскольку характерный размер молекулы a — порядка нескольких \AA , электронные энергии $E_{el} \sim 1$ эВ соответствуют частотам переходов, лежащим в видимой и ультрафиолетовой областях спектра. Колебательные энергии примерно в 100 раз меньше, и соответствующие частоты лежат в инфракрасной области. Вращательные энергии меньше еще в 100 раз, их частоты попадают в далекую инфракрасную область. Здесь расстояния между уровнями сравниваются с их радиационными ширинами и тепловым (доплеровским) уширением. Поэтому вместо отдельных тонких линий наблюдаются целые спектральные полосы (полосатые спектры). Так обстоит дело в некоторых молекулярных газах.

§ 13.3. Задачи

1. Найти по теории возмущений поправку к энергии атома He за счет взаимодействия электронов для основного состояния $1s^2$. Сделать то же самое, используя вариационный метод. Обсудить качественно влияние спина на уровни возбужденных состояний.
2. Измеренное значение энергии полной ионизации атома гелия (энергия, необходимая, чтобы оторвать оба электрона) составляет $5,8 R_y$. Определить энергию однократной ионизации этого атома.
3. Рассмотрите атом гелия, описываемый гамильтонианом (13.2) в приближении $\hat{H}_f + \hat{H}_{hf} + \hat{H}_L = 0$. Докажите, что полный орбитальный момент и полный спиновый момент системы двух электронов коммутируют с гамильтонианом и являются, тем самым, интегралами движения. Рассматривая взаимодействие между электронами, как возмущение, рассчитайте энергетические уровни для конфигурации $1s2s$ и убедитесь в том, что, благодаря обменному взаимодействию, энергия триплетного терма ниже энергии синглетного терма.
4. Указать все возможные термы конфигураций электронов $nsn'p$; $npn'p$; p^2 ; p^3 ; d^2 ; d^3 .
5. Найти термы и магнитные моменты основных состояний атомов
 $H, He, P, Cr, S, V, Al, C, N, O, Cl, Fe, Ti, Ge$.
Парамагнитные или диамагнитные свойства проявляет в слабом магнитном поле атом углерода, находящийся в нормальном состоянии?
6. Найти тонкую структуру первых двух уровней атома водорода.
7. Найти сверхтонкую структуру для основного состояния атома водорода, вычисляя непосредственно $\mathbf{B}(0)$ — магнитное поле электрона в районе ядра (задача 7.28 из [6]).
8. Атом бора ($Z=5$) имеет основную конфигурацию $1s^2 2s^2 2p$. Оценить спин-орбитальное расщепление в этом состоянии. Как выглядит здесь эффект Зеемана в слабом и в сильном поле?
9. Найти среднее значение магнитного момента электрона в состоянии $p_{1/2}$.
10. Две частицы с моментами $J_1 = 1$ и $J_2 = 4$ взаимодействуют по закону $U = C \mathbf{J}_1 \mathbf{J}_2$. Найти спектр стационарных состояний. Определить кратности вырождения. Найти среднее значение $\hat{\mu}_z = \mu_B (g_1 \hat{J}_{1z} + g_2 \hat{J}_{2z})$ при $J = 5$.
11. Найти магнитное поле, действующее на ядро со стороны электрона в состоянии $|n, \ell, \ell_z, j_z\rangle$.
12. Найти сдвиги уровней в магнитном поле в состояниях
а) $|J, M, L, S\rangle$, б) $|L, m_\ell, S, M_S\rangle$, в) $|J, M, J_1, J_2\rangle$; $\hat{\mu}_z = \mu_B (g_1 \hat{J}_{1z} + g_2 \hat{J}_{2z})$.
13. Оцените поправки к уровням энергии атома водорода, обусловленные взаимодействием магнитных моментов электрона и ядра (*сверхтонкое расщепление*).
14. 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)?

Глава 14

СИСТЕМЫ С ГАМИЛЬТониАНОМ, ЗАВИСЯЩИМ ОТ ВРЕМЕНИ

В этой главе мы рассмотрим системы с гамильтонианом, зависящим от времени. Чаще всего это — системы, находящиеся под действием внешнего поля, но это могут быть и распадающиеся системы, которые *удобно* описывать разными гамильтонианами до и после распада, и др.

§ 14.1. Постановка вопроса

∇ Пусть до «начала событий» система описывалась гамильтонианом \hat{H}_i (i — initial) с собственными состояниями $|k; i\rangle$ и уровнями энергии E_{ik} . В этой главе мы различаем вектор $|k; i\rangle$ — не зависящее от времени решение стационарного уравнения Шредингера с гамильтонианом \hat{H}_i , и зависящий от времени вектор $|k(t); i\rangle$ — решение полного уравнения Шредингера с тем же гамильтонианом и с той же энергией:

$$i\hbar d|k(t); i\rangle/dt = \hat{H}_i|k(t); i\rangle, \quad |k(t); i\rangle = |k; i\rangle e^{-E_{ik}t/\hbar}. \quad (14.1)$$

∇ Начиная с момента $t = t_0$ гамильтониан начал меняться под действием *возмущения* $\hat{V}(t)$ (обычно принимают $t_0 = 0$):

$$\hat{H}_i \rightarrow \hat{H} = \hat{H}_i + \hat{V}(t), \quad V(t < t_0) = 0. \quad (14.2)$$

∇ «После конца событий», при $t \rightarrow \infty$, система переходит в конечное состояние, которое описывается гамильтонианом $\hat{H}_f = \hat{H}_i + \hat{V}(\infty)$ с аналогичными собственными векторами $|r(r; f)\rangle$ и $|r(t); f\rangle$ и уровнями энергии E_{fr} (f — final). В такой системе нет стационарных состояний.

Здесь основная задача — найти вероятности переходов из начального состояния $|k; i\rangle$ в одно из состояний $|r; f\rangle$.

Наблюдение за системой в промежуточный момент времени необратимо изменяет ее, результат последующей эволюции искажается. Поэтому ответ на вопрос, *что случилось с системой «по дороге» из $|k; i\rangle$ в $|r; f\rangle$* , не содержит измеримой информации, относящейся к изучаемому процессу. Избранный метод описания может включать высказывания, выглядящие как рассказ о промежуточных этапах эволюции. При другом способе описания промежуточные этапы эволюции могут выглядеть совсем по-другому. Содержательный вопрос касается только сопоставления картин «до начала событий» и «после конца событий». Разумеется, ответ на него не зависит от способа описания.

§ 14.2. Общий подход

Обычно решения уравнения Шредингера ищут в виде разложения по собственным функциям исходного гамильтониана (14.1):

$$i\hbar d|\alpha(t)\rangle/dt = (\hat{H}_i + \hat{V}(t))|\alpha(t)\rangle, \quad |\alpha(t)\rangle = \sum_k a_k(t)|k(t); i\rangle. \quad (14.3)$$

Подставим это разложение в выписанное уравнение Шредингера. Производная по времени от множителя $|k(t); i\rangle$ в левой части уравнения дает вклад, компенсирующий $\hat{H}_i|k(t); i\rangle$ в правой части. Умножая после этого результат слева на $\langle m(t); i|$, получим *уравнение Шредингера в представлении взаимодействия* § 3.4:

$$i\hbar da_m/dt = \sum_k V_{mk}^t(t)a_k(t), \quad (14.4)$$

$$V_{mk}^t(t) = \langle m(t); i|V(q, t)|k(t); i\rangle \equiv V_{mk}(t)e^{i\omega_{mk}t}, \quad \omega_{mk} = (E_m^0 - E_k^0)/\hbar.$$

Это уравнение показывает во что переходят состояния «старого» базиса $\{|k; i\rangle\}$ под действием нашего возмущения. Подчеркнем, что оба матричных элемента $V_{mk}^t(t)$ и $V_{mk}(t)$ зависят от времени. (Оператор \hat{V}^t получился из \hat{V} с помощью оператора эволюции \hat{U}_0 (3.1a), (3.2) так же, как получались операторы физических величин (3.5) в гайзенберговской картине.)

∇ Обычно в качестве начального берут одно из стационарных состояний исходной системы $|n; i\rangle$. При этом $a_k(t=0) = \delta_{kn}$, а коэффициенты a_k иногда снабжаются вторым индексом (n) , т. е. $a_k \rightarrow a_{k(n)}$. Для состояния $|\psi\rangle$ (14.3), получающегося в этом случае, мы используем специальное обозначение $|n_V^t\rangle$:

$$|n_V^t\rangle = \sum_k a_{k(n)}(t)|k(t); i\rangle, \quad (|n_V^t(t=0)\rangle = |n; i\rangle). \quad (14.5)$$

◆ *Амплитудами перехода* называют коэффициенты разложения этого вектора по собственным векторам конечного состояния при $t \rightarrow \infty$,

$$A_{mn} \equiv A_{m(f)n(i)} = \langle m(t); f|n_V(t)\rangle|_{t \rightarrow \infty}. \quad (14.6a)$$

Вероятности перехода получают отсюда стандартным образом:

$$\omega_{mn} = |A_{mn}|^2. \quad (14.6б)$$

Рассматривают три варианта конечных состояний.

1. «После событий» возмущение выключается, и форма гамильтониана восстанавливается¹, т. е. набор $\{|k; f\rangle\}$ совпадает с набором $\{|k; i\rangle\}$.

2. После действия возмущения (например, при распаде ядер, ионизации и т. п.) возникает новая система, с новым гамильтонианом, и нужно еще найти стационарные состояния $|k; f\rangle$.

3. Включается периодическое поле (например, на систему действует поле лазерной волны), в котором стационарных состояний вообще нет, и даже наше понятие амплитуды перехода не определено. Обычно здесь предполагают, что внешнее поле в некоторый момент выключается (как в первом варианте).

◆ При описании переходов в непрерывный спектр физический интерес представляет вероятность перехода из состояния $|k; i\rangle$ не в одно состояние $|r; f\rangle$, но в целую группу близких состояний. Соответствующее изменение постановки задачи обсуждается в § 14.5.

§ 14.3. Теория возмущений

Во многих случаях возмущение $\hat{V}(t)$ таково, что под его действием невозмущенное решение меняется «не очень сильно», т. е. $|a_k(t) - \delta_{kn}| \ll 1$. В этом случае для решения возникающих задач применима теория возмущений.

• **Первое приближение** в решении уравнения (14.4) получается, если подставить в его правую часть нулевое приближение, $a_{k(n)} = \delta_{kn}$. Тогда это уравнение легко решается:

$$a_{m(n)}(t) = \delta_{mn} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt'. \quad (14.7)$$

Полученное соотношение определяет закон эволюции состояний «старого» базиса $\{|k; i\rangle\}$ под действием нашего возмущения. В соответствии с (14.5) состояние $|n; i\rangle$ с течением времени переходит в состояние¹

$$|n_V^t\rangle = |n(t); i\rangle - \frac{i}{\hbar} \sum_m \int_0^t V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}(t'-t)} dt' |m(t); i\rangle. \quad (14.8)$$

Множитель $e^{-i\omega_{mn}t}$ возник при переходе от базиса $|m; i\rangle$ к базису $|m(t); i\rangle$.

Амплитуда перехода из состояния $|n; i\rangle$ начального гамильтониана в состояние $|m; f\rangle$ вычисляется с помощью соотношения (14.6а). Соотношение (14.8) описывает разложение вектора состояния $|n_V^t\rangle$, который получился из исходного под действием нашего возмущения, по векторам состояния исходного базиса $\{|k(t); i\rangle\}$. Чтобы

¹ Этот подход часто используют при описании сложных систем. В частности, принимают, что в твердом теле при $t \rightarrow -\infty$ электроны были не взаимодействующими, затем включилось взаимодействие их друг с другом и с колебаниями решетки (с фононами), а затем при $t \rightarrow \infty$ взаимодействие выключается. Физически осмысленными является те результаты, которые не зависят от законов включения и выключения взаимодействия (в широком интервале их видоизменения).

¹ Обратите внимание на обозначения, $|n(t); i\rangle$ — волновой вектор начального состояния $|n; i\rangle$, каким он был бы к моменту времени t в отсутствие возмущения. Вектор состояния $|n_V^t\rangle$ — то, во что превратился вектор начального состояния $|n; i\rangle$ к моменту времени t под действием возмущения $V(t)$.

вычислить амплитуды перехода, удобно разложить базисные векторы конечного состояния $|r(t); f\rangle$ по векторам начального базиса $\{|k(t); i\rangle\}$. В первом приближении обычной теории возмущений (5.9), отвечающем выписанному приближению для n_V^t , искомое разложение имеет вид

$$|n(t); f\rangle = |n(t); i\rangle - \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}(\infty)}{\hbar\omega_{kn}} |k(t); i\rangle. \quad (14.9)$$

Покажем, как полученные результаты применяются в различных задачах.

◆ **А. Возмущение действует какое-то время, а затем выключается, $V(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$** — вариант 1 § 14.2. Тогда в конце мы опять имеем дело с невозмущенной системой, набор новых волновых векторов $\{|n; f\rangle\}$ совпадает с исходным $\{|n; i\rangle\}$, амплитуды перехода совпадают с коэффициентами $a_{m(n)}$ (14.7).

Вероятность перехода из начального состояния $|n; i\rangle$ в конечное состояние $|m; f\rangle \equiv |m; i\rangle$ равна (при $m \neq n$)

$$\omega_{mn} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} dt \right|^2. \quad (14.10)$$

◆ **Б. Возмущение, раз возникнув, затем действует неограниченно долго, $V(t) \rightarrow V(\infty)$ при $t \rightarrow \infty$** — вариант 2 § 14.2. При этом новый набор собственных функций отличается от старого, $\{|n; f\rangle\} \neq \{|n; i\rangle\}$, см. (14.9). Проинтегрируем выражение $a_{m(n)}$ (14.7) при $m \neq n$ по частям (до перехода к пределу $t \rightarrow \infty$) и учтем, что в подстановке вклад на нижнем пределе исчезает («до начала событий» возмущение отсутствовало):

$$a_{m(n)} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt' = -\frac{V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t}}{\hbar\omega_{mn}} \Big|_0^t + \int_0^t \frac{dV_{mn}(t')}{dt'} \frac{e^{i\omega_{mn}t'}}{\hbar\omega_{mn}} dt'.$$

Подставляя теперь в выражение для амплитуды перехода (14.6) найденные выражения для проэволюционировавшего вектора начального состояния $|n_V(t)\rangle$ (14.8) и для базисного вектора конечного состояния (14.9), найдем при $t \rightarrow \infty$ амплитуду перехода:

$$A_{mn} = \frac{1}{\hbar\omega_{mn}} \int_0^\infty \frac{dV_{mn}}{dt} e^{i\omega_{mn}t} dt. \quad (14.11)$$

∇ При медленном (*адиабатическом*) включении возмущения V (с характерным временем изменения T) экспонента под интегралом множится на «почти постоянную» малую величину $dV/dt \sim V/T$, что дает для интеграла величину порядка $1/\omega_{ji}T$. Иными словами, состояние системы не изменяется с точностью до поправок $\mathcal{O}(1/(\omega_{ji}T)^2)$.

• **Второе приближение.** Амплитуда вероятности перехода в некоторые состояния в первом порядке теории возмущений иногда оказывается малой или просто

исчезает. В этих случаях необходимо учесть следующее приближение теории возмущений. В частности, второе приближение получается при подстановке в правую часть уравнения (14.4) первого приближения (14.7):

$$a_{m(n)}(t) = \delta_{mn} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt' - \frac{1}{\hbar^2} \sum_{r \neq m, n} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 V_{mr}(t_1) e^{i\omega_{mr}t_1} V_{rn}(t_2) e^{i\omega_{rn}t_2}. \quad (14.12)$$

Вся последующая процедура не отличается от той, что развита при обсуждении первого приближения.

• **Связь со стационарной теорией возмущений § 5.2.** Чтобы описать действие постоянного во времени возмущения V , введем вспомогательный объект — возмущение $V(t) = Ve^{\varepsilon t}$ ($\varepsilon \rightarrow 0$), совпадающее с V в настоящее время и исчезающее «в далеком прошлом». Экспоненциальный множитель обеспечивает сходимость интегралов (от $t = -\infty$ до $t = 0$), и получившиеся результаты очень просто преобразуются в коэффициенты разложения волновой функции по невозмущенному базису § 5.2. В сущности, именно это соответствие использовалось при выводе (14.11).

14.3.1. Пример. Возбуждение атома водорода пролетающим ионом

Пусть мимо атома водорода, находящегося в основном состоянии, пролетает тяжелый ион с зарядом Z и массой M на достаточно большом расстоянии (прицельный параметр) $\rho \gg a_B$. Требуется оценить вероятность перехода атома $W(\rho)$ в возбужденное состояние, для определенности с $n = 2$.

Интересующий нас эксперимент состоит в изучении переходов под действием пучка ионов, прицельный параметр каждого из которых обычно не измеряется. Пока скорость иона не чрезмерно мала, неопределенность в значениях прицельного параметра $\Delta\rho \sim \hbar/(M\Delta v)$ значительно меньше характерного атомного размера a_B (при $\Delta v > (m_e/M)c\alpha$). Поэтому можно считать, что вклады, доставляемые в вероятность перехода различными значениями ρ не интерферируют, т. е. ответ определяется суммированием вероятностей перехода по всем значениям прицельного параметра, которое описывается сечением процесса

$$\sigma = \int W(\rho) 2\pi\rho d\rho \quad (14.13)$$

(см. обсуждение понятия сечения в курсе Механика и в разд. 15). Наш анализ помогает получить это сечение, если вклад области $\rho > a_B$ не мал по сравнению с вкладом области $\rho \lesssim a_B$.

Итак, в нашей задаче невозмущенный гамильтониан $\hat{H}_0 = \hat{H}_H + \hat{K}$, где \hat{H}_H — обычный гамильтониан атома водорода, а $\hat{K} = \hat{p}_i^2/(2M)$ — стандартный оператор кинетической энергии иона. Обозначим через \mathbf{R} , \mathbf{r}_e и \mathbf{r}_p координаты иона, электрона и протона соответственно, а через $\mathbf{r} = (x, y, z) = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p$ координату электрона

относительно ядра. Выберем за ось x направление движения иона, а за ось y — направление от ядра к иону в точке наибольшего сближения. При наших условиях движение иона можно считать прямолинейным так, что вектор $\mathbf{R} = (vt, \rho, 0)$.

Возмущение есть сумма вкладов взаимодействия иона с ядром и с электроном,

$$V(t) = \frac{Ze^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_p|} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_e|}.$$

Считая r_e/R и r_p/R малыми величинами, разложим возмущение по этим малым параметрам, и получим, что возмущение сводится к воздействию иона на атом в целом, а не на протон и электрон по отдельности:

$$V(t) = -\frac{Ze^2(\mathbf{Rr})}{R^3} \equiv -\frac{Ze^2(xvt + y\rho)}{(\rho^2 + v^2t^2)^{3/2}} \quad \text{при } \rho \gg a_B. \quad (14.14)$$

(Условие $\rho \gg a_B$ появилось потому, что в атоме водорода характерные значения расстояния между электроном протоном r по порядку величины даются Боровским радиусом a_B .)

Оператор возмущения линеен по координатам вектора ρ . Поэтому в соответствии с правилами отбора разд. 11.2.1 переходы из основного s -состояния $|i\rangle = |1, 0, 0\rangle$ возможны только в p -состояния с $\ell = 1$. При нашем выборе осей это — состояния с $m = \pm 1$. Мы рассматриваем только переходы в состояние с $n = 2$, т. е. конечные состояния $|f\rangle = |2, 1, \pm 1\rangle$. При этом $\hbar\omega_{fi} = 1R_y - (1/4)R_y = (3/4)R_y$. Используя волновые функции (7.22а), (7.22в), нетрудно вычислить теперь $x_{fi} = \pm iy_{fi} = -(2^7/3^5)a_B$ и после простых переобозначений с учетом (7.14) получить матричные элемент переходов в состояния $|f\rangle = |2, 1, \pm 1\rangle$ в виде

$$a_{f\pm i}(\infty) = \frac{2Ze^2x_{fi}}{\hbar v\rho} I_{\pm}(\beta), \quad \text{где } I_{\pm}(\beta) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\beta u} \frac{1 \pm iu}{(1+u^2)^{3/2}}, \quad (14.15)$$

$$u = \frac{vt}{\rho}, \quad \beta = \frac{\omega_{fi}\rho}{v} = \frac{3}{8} \frac{\rho}{a_B} \frac{c\alpha}{v}.$$

Определяющий параметр нашей задачи β записан в виде произведения двух величин (и численного фактора $3/8$). Величина ρ/a_B подлежит интегрированию в выражении сечения (14.13), рассматриваемая физическая картина оправдана только если эта величина велика. Величина $c\alpha/v$ представляет собой отношение характерной скорости движения электрона в атоме $c\alpha$ к скорости иона, оно может меняться в широких пределах — от $M/m_e \sim 10^4$ (см. выше оценку неопределенности ρ) до $\alpha \sim 0,01$.

Чтобы вычислить входящий в (14.15) интеграл, превратим его в контурный, замкнув в верхней полуплоскости по дуге большого круга, где интеграл дает в ноль. Единственной особенностью внутри этого контура является корневой разрез, начинающийся в точке $u = i$. Сделав замену $u = i(1 + w)$, направим теперь путь интегрирования вверх, а затем (пересекши разрез) вниз по действительной оси. Тогда контурный интеграл сведется к разности интегралов на двух берегах разреза, и

мы получим, например,

$$I_+(\beta) = e^{-\beta} \int_0^{\infty} e^{-\beta\omega} \frac{d\omega}{\sqrt{\omega(2+\omega)^3}}.$$

Этот интеграл монотонно падает с ростом β . При $\beta \ll 1$ сходимость интеграла обеспечивается корнем в знаменателе, экспоненту под интегралом можно отбросить. Остающийся интеграл легко вычисляется. При $\beta \gg 1$ интеграл быстро сходится в области $\omega \lesssim 1/\beta$, и подкоренное выражение под интегралом можно заменить просто на 8ω . В итоге

$$\text{При } \beta \ll 1 : I_{\pm}(\beta) = 1; \text{ при } \beta \gg 1 : I_+(\beta) \approx \sqrt{\frac{\pi}{8\beta}} e^{-\beta}.$$

◇ Для медленного иона ($v \lesssim c\alpha$) величина $\beta \gg 1$ при всех допустимых нашим приближением (14.14) значениях прицельного параметра ($\rho > a_B$). При этом рассматриваемая вероятность экспоненциально мала:

$$W = |a_{f+i}|^2 + |a_{f-i}|^2 = AZ^2 \frac{\alpha c}{v} \left(\frac{a_B}{\rho}\right)^3 e^{-2\beta}; \quad A = \frac{2^{17}}{3^{11}} \pi = 2,32.$$

Мы не имеем разумной оценки для вклада небольших прицельных параметров, и поэтому сечение (14.13) в этом случае не оценивается. наш результат имеет смысл лишь в том случае, если удастся измерить прицельный параметр.

◇ Для быстрого иона ($v \gg c\alpha$) при очень больших значениях прицельного параметра вероятность перехода описывается предшествующей формулой, т. е. экспоненциально мала. Однако, существует и область значений прицельного параметра $\rho \ll (8/3)(v/c\alpha)a_B$, где $\beta \ll 1$, и вероятность перехода

$$W(\rho) = BZ^2 \left(\frac{c\alpha}{v}\right)^2 \left(\frac{a_B}{\rho}\right)^2; \quad B = \frac{2^{17}}{3^{10}} = 2,22.$$

В интеграле (14.13) вклад прицельных параметров $\rho > (8/3)(v/c\alpha)a_B$ экспоненциально мал, и мы не будем его учитывать. Вклад области $\rho \lesssim a_B$ не описывается нашим приближением, но нет причин, чтобы он был аномально большим. Поэтому основной в сечение происходит из области $a_B < \rho < (8/3)(v/c\alpha)a_B$ (за счет ее большой ширины), что дает сечение нашего процесса с логарифмической точностью.

$$\sigma \approx \int_{a_B}^{(8/3)(v/c\alpha)a_B} W(\rho) 2\pi\rho d\rho = 2\pi a_B^2 BZ^2 \left(\frac{c\alpha}{v}\right)^2 \ln(8v/3c\alpha) \pi a_B^2.$$

Заметим, что получившийся логарифм не превосходит 6. Поэтому качество оценки — не очень высокое.

§ 14.4. Скачкообразное изменение гамильтониана

Пусть гамильтониан меняется к новому значению \hat{H}_f очень быстро, т. е. за время Δt , малое по сравнению с характерными временами осцилляций между состоянием $|i\rangle$ и другими состояниями $\hbar/|E_i - E_k|$. (Примеры: быстрое включение поля, действующего на атом внутри конденсатора; β -распад ядра в атоме). В этом случае с точностью до поправок $\sim \omega_{fi}\Delta t$ ответ получается без предположения о слабости возмущения.

При $\omega_{fi}\Delta t \ll 1$ волновая функция не успевает измениться при изменении гамильтониана. Но далее она эволюционирует уже по закону, определяемому гамильтонианом \hat{H}_f . Амплитуда перехода в одно из его собственных состояний $|n; f\rangle$ есть $\langle n; f|k; i\rangle$, а вероятность этого перехода $\omega_{fn,ik} = |\langle n; f|k; i\rangle|^2$. В этом интеграле обе волновые функции взяты в момент изменения потенциала ($t = 0$). В частности, соотношение (14.11) дает в этом случае

$$\omega_{fi} = |V_{fi}/(\hbar\omega_{fi})|^2. \quad (14.16)$$

■ Примеры

• Включение поля в осцилляторе

Пусть заряженный осциллятор находится в основном состоянии $|0\rangle$ в отсутствие внешнего поля. В некоторый момент включается постоянное внешнее поле \mathcal{E} , т. е. постоянная сила $F = e\mathcal{E}$, при этом к гамильтониану добавляется слагаемое $V = -xF$. Новый гамильтониан соответствует осциллятору с той же частотой и со смещенным положением равновесия $x \rightarrow x - a$, где $a = F/m\omega^2$. При этом $\psi_{k;i}(x) = \psi_k(x - a)$, где $\psi_k(x)$ — хорошо известная волновая функция осциллятора (4.20) (второй вариант конечных состояний)¹. Вычислим вероятность того, что система останется в основном состоянии ω_{00} , используя волновую функцию (4.19):

$$\begin{aligned} \omega_{00} &= \left| \int dx C^2 e^{-x^2/2x_0^2} e^{-(x-a)^2/2x_0^2} \right|^2 = \left| \int dx C^2 e^{-(x^2 - xa + a^2/2)/x_0^2} \right|^2 = \\ &= \left| \int dx C^2 e^{-(x-a/2)^2/x_0^2 - a^2/4x_0^2} \right|^2 = e^{-F^2/(2\hbar m\omega^3)}. \end{aligned}$$

Аналогичным образом вычисляется и вероятность перехода в n -е состояние. Простые, но громоздкие вычисления показывают, что вероятности переходов в состояния $|n; f\rangle$ распределены по закону Пуассона (4.37):

$$\omega_{n0} = \frac{u^n}{n!} e^{-u}, \quad u = \frac{F^2}{2\hbar m\omega^3}. \quad (14.17)$$

Видно, что при небольших значениях F вероятность возбуждения разных состояний быстро падает с ростом n , обычная теория возмущений работает только при очень малых F .

¹Это означает, что наше состояние — когерентное состояние нового гамильтониана (4.30) с $\alpha = a/(x_0\sqrt{2})$. Для амплитуд перехода и вероятностей можно воспользоваться теперь результатами раздела 4.4, что немедленно дает (14.17).

• **Изменение состояния атома при β -распаде.**

Атом трития (водород с ядром, вдвое более тяжелым, чем протон H^3) находится в основном состоянии. В атомном масштабе β — распад ядра ($H^3 \rightarrow He^3 + e + \bar{\nu}$) происходит мгновенно. Энергия электрона значительно больше атомной. Поэтому получившиеся электрон и антинейтрино улетают, практически не взаимодействуя с атомным электроном, а ядро превращается в ядро He^3 .

▲ Пренебрегая отдачей ядра, определить вероятность того, что получившийся водородоподобный атом He^+ (а) *останется в основном состоянии*; (б) *перейдет на n -й уровень*. Оценить поправку на отдачу ядра для перехода в основное состояние (дать численные оценки).

Рассмотрим пример — β -распад атома трития. Изотоп водорода 3H (тритий) распадается по схеме ${}^3H \rightarrow {}^3He^+ + e + \bar{\nu}$ с периодом полураспада 12,26 года и с выделением энергии $\varepsilon = 0,0186$ МэВ на распад. Отдельный акт распада происходит за характерное время слабого взаимодействия $\sim 10^{-26}$ с, т. е. практически мгновенно с точки зрения атомных времен (порядка 10^{-15} с). Электрон и антинейтрино практически мгновенно улетают от ядра. Поэтому атомный процесс состоит в мгновенном превращении атома водорода с тяжелым ядром 3H , имеющим заряд e , в водородоподобный атом ${}^3He^+$ с одним электроном, оставшимся от исходного атома и зарядом ядра $2e$. Термы таких атомов описываются в точности так же, как термы атома водорода (§ 7.3). Возникает естественный вопрос.

△ Пусть сначала атом трития находился в каком-то состоянии $|n, \ell, m\rangle_H$ (для упрощения выкладок примем $|n, \ell, m\rangle_H = |1, 0, 0\rangle_H$). Какова вероятность того, что после распада получившийся атом окажется в состоянии $|n', \ell', m'\rangle_{He}$?

Главный эффект состоит здесь в скачкообразном изменении заряда ядра. В первом приближении мы пренебрежем эффектом отдачи. Амплитуда перехода есть $A_{fi} = \langle 1, 0, 0 | n', \ell', m' \rangle_{He}$. В силу сохранения момента импульса, амплитуда перехода отлична от нуля только при $\ell' = 0, m' = 0$. Дальнейшие выкладки с использованием водородоподобных волновых функций достаточно просты.

§ 14.5. Периодическое возмущение

Рассмотрим важный случай периодического возмущения:

$$\hat{V} = \hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{G}e^{i\omega t} \equiv \hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{F}^+e^{i\omega t}. \quad (14.18)$$

(Равенство $\hat{G} = \hat{F}^+$ — следствие эрмитовости оператора \hat{V}).

Мы будем вычислять вероятности переходов к моменту времени t в первой постановке, полагая, что возмущение может быть просто выключено в этот момент времени.

14.5.1. Нерезонансное возмущение

Если нерезонансное возмущение мало, можно использовать теорию возмущений. Подставив (14.18) в (14.7), найдем (без учета начального условия)

$$a_{m(n)}(t) = \delta_{mn} - \frac{F_{mn} (e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} - 1)}{\hbar(\omega_{mn} - \omega)} - \frac{F_{nm}^* (e^{i(\omega_{mn}+\omega)t} - 1)}{\hbar(\omega_{mn} + \omega)}. \quad (14.19)$$

Это решение справедливо только при $|F_{mn}| \ll \hbar|\omega_{mn} \pm \omega|$.

14.5.2. Почти резонансное возмущение

Теория возмущений неприменима, если для какого-то уровня m «расстройка» $\varepsilon \equiv \omega_{mn} - \omega$ близка к нулю, т. е. если возмущение почти резонансное. В этом случае следует решать уравнение (14.4) в совсем другом приближении, учитывая в первую очередь «резонирующие» уровни. «Резонирующие» уровни в таком случае следует учесть точно, а остальные учесть (если нужно) как малые возмущения.

Будем считать, что «резонирует» только одна пара уровней, т. е. нет других пар уровней a, b таких, что «расстройка» $\omega_{ab} - \omega$ близка к нулю. Тогда в уравнениях (14.4) остается только пара резонирующих уровней, и наша система уподобляется паре связанных классических осцилляторов под воздействием почти резонансной силы. Главный вклад в переходы, содержащий малые частоты $\varepsilon \equiv \omega_{mn} - \omega$, дается системой уравнений:

$$i\hbar \frac{da_{m(n)}}{dt} = F_{mn} e^{i\varepsilon t} a_{n(n)}, \quad i\hbar \frac{da_{n(n)}}{dt} = F_{mn} e^{-i\varepsilon t} a_{m(n)}. \quad (14.20)$$

Подставим $a_{n(n)}$ из первого уравнения во второе и найдем

$$\frac{d^2 a_{m(n)}}{dt^2} - i\varepsilon \frac{da_{m(n)}}{dt} + \frac{F_{mn}^2}{\hbar^2} a_{m(n)} = 0.$$

Возможное отличие фазы величины F_{mn} от нуля можно скомпенсировать изменением начала отсчета времени. Поэтому будем считать эту величину действительной. Обозначив $\eta = F_{mn}/\hbar$ и $\Omega = \sqrt{\varepsilon^2/4 + \eta^2}$, с использованием начального условия $a_{k(n)} = \delta_{kn}$ получим теперь решение этого уравнения:

$$a_{m(n)} = -\frac{i\eta}{\Omega} e^{i\varepsilon t/2} \sin \Omega t, \quad a_{n(n)} = \left(\cos \Omega t + \frac{i\varepsilon}{2\Omega} \sin \Omega t \right) e^{-i\varepsilon t/2}. \quad (14.21a)$$

Полезно выписать также

$$|a_{m(n)}|^2 = \frac{\eta^2}{\Omega^2} \sin^2 \Omega t, \quad |a_{n(n)}|^2 = 1 - \frac{\eta^2}{\Omega^2} \sin^2 \Omega t. \quad (14.21б)$$

Полученное решение означает, что система периодически, с частотой Ω , переходит из состояния $|n0\rangle$ в $|m0\rangle$ и обратно. Появившиеся биения с приближением к резонансу (с уменьшением ε) становятся все полнее.

▽ Разумеется, это решение справедливо, только если получившаяся частота биений $\Omega \ll \omega$. Это условие, кроме требования $\varepsilon \ll \omega_{mn}$, налагает также и требование обычной теории возмущений $|F_{mn}| \ll \hbar\omega_{mn}$.

◆ Учет в уравнениях (14.20) для $a_{n(n)}$ и $a_{m(n)}$ отброшенных высокочастотных слагаемых, (содержащих частоты $\omega + \omega_{mn}$) лишь несущественно изменит картину. Рассмотрение таких слагаемых обычно не имеет смысла без учета переходов в другие состояния. Возможность таких переходов приводит к уменьшению вероятности того,

что система находится в резонирующих состояниях, это выглядит как затухание. Поскольку число этих нерезонансных состояний бесконечно велико, через очень большое время система может совсем «уплыть» из резонирующих состояний. Наше рассмотрение справедливо для умеренно больших интервалов времени.

§ 14.6. Переходы в непрерывный спектр

Рассмотрим теперь задачу о переходе в непрерывный спектр под действием периодической внешней силы. Важным примером здесь является фотоэффект — вылет электронов из атома (или другой системы) под действием света (периодического электромагнитного поля). У таких задач есть две особенности.

- Состояния непрерывного спектра не локализируются в какой-то конечной области, они соответствуют почти свободно движущимся частицам, которые уходят далеко от нашей системы и потому не могут в нее вернуться (электрон просто улетает от ядра и не может быть захвачен им). Поэтому обратные переходы здесь не происходят, и биений не возникает.
- Конечных состояний с данной энергией много (например, при фотоэффекте электрон может вылететь в произвольном направлении). Скорость ухода из начального (связанного) состояния домножается на число возможных конечных состояний.

◆ Для таких систем немного меняется постановка задачи.

Вероятность перехода выражается через амплитуду перехода (14.6а) и плотность числа состояний $\rho(\nu)$ соотношением

$$d\omega_{ji} = |A_{ji}(\nu)|^2 \rho(\nu) d\nu. \quad (14.22)$$

Далее предполагается, что в начальном состоянии находится много одинаковых атомных систем, и изучается скорость переходов (их число на единицу времени):

$$r_{ji} = \lim_{t \rightarrow \infty} \int \frac{d\omega_{ji}}{t} \rho(\nu_j) d\nu_j. \quad (14.23)$$

При этом мы считаем время наблюдения не слишком большим так, что число частиц, находящихся в начальном состоянии N_i за это время уменьшается незначительно, т. е. $r_{ji} \cdot t \ll 1$. При увеличении времени наблюдения следует записать, очевидно,

$$dN_i = -N_i r_{ji} dt \Rightarrow N_i = N_{i0} e^{-r_{ji} \cdot t}. \quad (14.24)$$

14.6.1. Плотность числа состояний

В изучаемых задачах физический интерес представляют вероятности перехода не в одно состояние $|f\rangle$, но в целую группу близких состояний. Мы нумеруем эти состояния значком ν и интересуемся переходами в состояния, лежащие в интервале от ν до $\nu + d\nu$. Обычно это число пропорционально объему системы V . Обозначим через $dN = V \rho(\nu) d\nu$ число различных конечных состояний системы, принадлежащих этому интервалу. Функцию $\rho(\nu)$ называют *плотностью числа состояний* по

ν (в единице объема). Если энергии частиц велики по сравнению с энергией взаимодействия U , то большую часть времени частица проводит в области, где ее движение почти свободное. Далее всю систему заключают в большой кубический ящик со стороной L (объем $V = L^3$) с непрозрачными стенками. Получив решение, переходят к пределу $L \rightarrow \infty$ там, где это возможно.

Найдем сначала число состояний ΔN с величиной импульса (по модулю) в интервале $(p, p + \Delta p)$. Для рассматриваемых состояний волновая функция частицы — стоячая волна $\psi = A \sin(\pi n_x x/L) \sin(\pi n_y y/L) \sin(\pi n_z z/L)$. Это — суперпозиция плоских волн, отвечающих значениям импульса $\mathbf{p} = \pi \hbar (\pm n_x, \pm n_y, \pm n_z)/L$ с положительными целыми значениями n_x, n_y, n_z . Количество целочисленных значений n_i , при которых импульс попадает в интервал $\Delta^3 p$ (число возможных квантовых состояний в этом интервале), равно $\Delta N = 2L^3 \Delta^3 p / (\pi \hbar)^3$ (дополнительный множитель 2 появился из-за наличия двух спиновых состояний для электрона или двух поляризаций для фотона). С учетом того, что при переходе к распределению по величине импульса p надо учесть только положительные n_i , $\Delta^3 p \Rightarrow 4\pi p^2 \Delta p/8$, и $\Delta N = V \pi p^2 \Delta p / (\pi \hbar)^3$.

То же число состояний можно получить, считая ящик периодически продолженным на все пространство и наложив условие периодичности на границах. Здесь могут распространяться бегущие волны так, что на период приходится целое число волн $n_i \lambda = L$. При этом числа n_i могут быть и положительными и отрицательными. Число возможных квантовых состояний в интервале $\Delta^3 p$ есть $\Delta N = 2L^3 \Delta^3 p / (2\pi \hbar)^3$.

Третий способ получить тот же ответ состоит в использовании квазиклассического приближения, согласно которому на элемент $\Delta p \Delta q$ фазового объема приходится $\Delta p \Delta q / (2\pi \hbar)$ квантовых состояний (5.25).

∇ В полярных координатах, обозначая элемент телесного угла в пространстве импульсов через $d\Omega_p$, мы имеем ΔN и $\rho(|p|)$:

$$\Delta N = \frac{V 2p^2 \Delta p d\Omega_p}{(2\pi \hbar)^3} \Rightarrow \frac{V 8\pi p^2 dp}{(2\pi \hbar)^3} \Rightarrow \rho(|p|) = 8\pi p^2 / (2\pi \hbar)^3. \quad (14.25a)$$

◇ Для перехода к распределению по энергиям ($\nu = E$) выразим импульс через энергию, т. е. для электронов (e) положим в (14.25a) $p = \sqrt{2mE}$; а для фотонов (γ) запишем $p = E/c$ или для распределения по частотам ($\nu = \omega$) запишем $p = \hbar\omega/c$. Это дает

$$dN_e = V \rho_e(E) dE, \quad \rho_e(E) = \frac{4\pi \sqrt{E} (2m)^{3/2}}{(2\pi \hbar)^3}, \quad (14.25б)$$

$$dN_\gamma = V \rho_\gamma(\omega) d\omega, \quad \rho_\gamma(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}. \quad (14.25в)$$

В более сложных системах может обнаружиться другая форма зависимости $\rho(\nu)$.

14.6.2. Переходы в непрерывный спектр под действием слабого периодического внешнего поля

Рассмотрим переход в непрерывный спектр под действием слабого периодического возмущения (14.10). Поскольку обратные переходы редки, здесь не возникает

резонансных условий, и теория возмущений (14.19) работает вне зависимости от частоты внешней силы. Перепишем ответ (14.19) в другой форме для случая, когда энергия конечного состояния выше энергии начального состояния, т. е. приняв $\omega_{ji} > 0$, запишем

$$a_{ji} = A_\varepsilon + A_\Delta, \quad \text{где} \quad \begin{cases} A_\varepsilon = -F_{ji} \frac{e^{i\varepsilon t/2} 2i \sin(\varepsilon t/2)}{\hbar \varepsilon} & (\varepsilon = \omega_{ji} - \omega), \\ A_\Delta = -F_{ji}^* \frac{e^{i\Delta t/2} 2i \sin(\Delta t/2)}{\hbar \Delta} & (\Delta = \omega_{ji} + \omega). \end{cases}$$

По общим формулам, вероятность перехода

$$\omega_{ji} = \int [|A_\varepsilon|^2 + 2\text{Re}(A_\varepsilon A_\Delta^*) + |A_\Delta|^2] \rho(E_f) dE_f,$$

где в частности $|A_\varepsilon|^2 = |F_{ji}|^2 \sin^2(\varepsilon t/2)/(\hbar \varepsilon)^2$. С ростом времени t относительные величины слагаемых $\text{Re}(A_\varepsilon A_\Delta^*)$ и $|A_\Delta|^2$ уменьшаются, а вклад слагаемого $|A_\varepsilon|^2$ сосредоточивается во все более узкой области $|\varepsilon| = |E_f/\hbar - \omega| \lesssim 1/t$. Скорость перехода (14.19) получается из этой вероятности делением на t и переходом $t \rightarrow \infty$. После этого остается лишь квадрат первого слагаемого и интеграл по области, содержащей состояние f , для которого $\omega_{ji} = \omega$:

$$r_{ji} = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{\Delta E_f} \rho(E_f) dE_f \left| \frac{F_{ji}}{\hbar} \right|^2 \frac{4 \sin^2(\varepsilon t/2)}{\varepsilon^2 t}.$$

Математическая вставка

Рассмотрим выражение

$$f(\alpha) = \lim_{t \rightarrow \infty} f(\alpha, t), \quad f(\alpha, t) = \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t}.$$

Заметим, что

$$f(\alpha, t) \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{если } \alpha \neq 0 \\ t/\pi & \text{если } \alpha \rightarrow 0 \end{cases} \quad \text{при } t \rightarrow \infty.$$

Кроме того,

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} f(\alpha, t) \phi(\alpha) d\alpha &\equiv \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t} \phi(\alpha) d\alpha = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\varepsilon t}^{\varepsilon t} \frac{\sin^2 y}{y^2} \phi(y/t) dy \rightarrow \phi(0) \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 y}{y^2} dy \rightarrow \phi(0). \end{aligned}$$

Последний интеграл, несомненно, сходится. Это — число. Коэффициент подобран так, что оно равно 1. Таким образом, функция $f(\alpha)$ обладает всеми свойствами δ -функции, т. е.

$$f(\alpha) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t} = \delta(\alpha). \quad (14.26)$$

С помощью этого соотношения находим скорость перехода

$$\begin{aligned} r_{ji} &= \int_{\Delta E} \rho(E_f) dE_f \left| F_{ji}/\hbar \right|^2 2\pi \delta(\omega_{ji} - \omega) d\Omega = \\ &= \int \left| F_{ji}/\hbar \right|^2 \cdot 2\pi \hbar \rho(E_f) |_{E_f=E_i+\hbar\omega} d\Omega. \end{aligned} \quad (14.27)$$

Итак, в пределе $t \rightarrow \infty$ должен выполняться закон сохранения энергии. При конечных временах все более существенными становятся другие значения энергии $E_j \neq E_i + \hbar\omega$. Их характерный разброс увеличивается с уменьшением t в соответствии с соотношением неопределенностей $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$.

§ 14.7. Фотоэффект

Пусть на атомную систему, находящуюся в стационарном состоянии i падает электромагнитная плоская монохроматическая волна. Под действием поля этой волны электрон может вылететь из атома (конечное состояние f — состояние электрона в поле атомного остатка). Такое явление называют *фотоэффектом*¹.

Явление фотоэффекта дало первые важнейшие аргументы в пользу существования фотонов как квантов электромагнитного излучения (*Эйнштейн*, 1905). При прохождении фотонов не слишком больших энергий ($\hbar\omega \lesssim 1$ МэВ) через вещество полное сечение их поглощения определяется в основном фотоэффектом.

В качестве важного **примера** рассмотрим *фотоэффект на атоме водорода, находящемся в основном состоянии (7.22а) с энергией $E_i = -R_y$* . Чтобы не усложнять вычисления, мы рассмотрим здесь случай только умеренно больших частот поля

$$R_y = mc^2\alpha^2/2 \ll \hbar\omega \ll m_e c^2. \quad (14.28a)$$

Это условия означают, что скорость вылетевшего электрона $v = p/m$ значительно больше характерной скорости электрона в атоме $c\alpha$ и мала по сравнению со скоростью света c (что обеспечивает возможность нерелятивистского рассмотрения):

$$c\alpha \ll v = \frac{p}{m} \ll c. \quad (14.28б)$$

Первое условие означает также, что $pa_B/\hbar \gg 1$. Это условие позволяет с хорошей точностью считать также, что энергия вылетевшего электрона совпадает с энергией фотона в волне и что импульс фотона $\hbar k = \hbar\omega/c$ мал по сравнению с импульсом вылетевшего электрона p :

$$E_f \equiv \mathbf{p}^2/(2m) \approx \hbar\omega, \quad \hbar k = \frac{\hbar\omega}{c} \ll p = \frac{2E_f}{v} \Rightarrow \frac{\hbar k}{p} \approx \frac{v}{2c}. \quad (14.28в)$$

В этих условиях вылетевший электрон задерживается вблизи оставшегося иона на время, меньшее характерного атомного времени (7.14). Поэтому для него можно с хорошей точностью использовать волновую функцию свободного движения²

$$\psi_f = e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}. \quad (14.29)$$

¹В задачах физики твердого тела различают *внешний фотоэффект* с вылетом электрона из исследуемого образца и *внутренний фотоэффект* с вылетом ранее связанного электрона в зону проводимости.

²Стоит заметить, что для возбужденных состояний атома водорода и для молекулярных термов условие (14.28), обеспечивающее применимость приближения (14.29), ослабляется, например, для атома водорода ($\hbar\omega > mc^2\alpha^2/2$) \rightarrow ($\hbar\omega > mc^2\alpha^2/(2n^2)$).

Для вычисления вероятности перехода мы используем результат (14.27). Входящий в ответ оператор возмущения \hat{F} (14.18) в соответствии с (10.6) имеет вид

$$\hat{F} = -\frac{e}{mc} (\mathbf{A}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \mathbf{A}_0^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{p}} \equiv i \frac{e}{m\omega} (\mathbf{E}_0 e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \mathbf{E}_0^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}) \hat{\mathbf{p}}.$$

(Мы воспользовались здесь выражением вектора-потенциала через электрическое поле в кулоновской калибровке $\mathbf{E} = (i\omega/c)\mathbf{A}$ (12.21).) В соответствии с (12.25) оператору уничтожения фотона отвечает первое слагаемое этого выражения.

Матричный элемент оператора возмущения между начальным состоянием электрона в основном состоянии атома водорода (7.22a) и его конечным состоянием (14.29) (с поглощением фотона) вычисляется следующим образом. Сначала выполняется интегрирование по частям и отбрасывается $\hbar k$ по сравнению с p — в силу (14.28в). Затем выполняется интегрирование по направлениям вектора \mathbf{r} относительно направления \mathbf{p} , и в конце выполняется интегрирование по r :

$$\begin{aligned} F_{ji} &= -\frac{e\hbar}{m\omega} \mathbf{E}_0 \int e^{-i(\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar - \mathbf{k}\mathbf{r})} \nabla \frac{e^{-r/a_B}}{\sqrt{\pi a_B^3}} d^3 r = i \frac{8e\sqrt{\pi a_B^3}}{m\omega} \frac{(\mathbf{p}\mathbf{E}_0)}{(1 + p^2 a_B^2/\hbar^2)^2} \approx \\ &\approx i \frac{8e\hbar^4 (\mathbf{p}\mathbf{E}_0)}{m\omega p^4} \sqrt{\frac{\pi}{a_B^5}}. \end{aligned}$$

Введем еще единичный вектор, направленный вдоль импульса вылетевшего электрона $\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$ и частоту $\omega_0 = R_y/\hbar$. В этих обозначениях выражение для числа вылетов электрона в элемент телесного угла $d\Omega$ за единицу времени (14.27) принимает вид

$$dr_{ji} = \frac{64a_B^3}{\pi\hbar} |(\mathbf{n}\mathbf{E}_0)|^2 \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{9/2} d\Omega.$$

Деление этого выражения на полный поток падающих фотонов в волне $cE_0^2/(2\pi\hbar\omega)$ (величину вектора Пойнтинга (12.17), деленную на энергию одного фотона $\hbar\omega$) дает дифференциальное сечение фотоэффекта

$$d\sigma = 64\alpha a_B^2 \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{7/2} \cos^2\theta d\Omega, \quad (14.30)$$

где θ — угол вылета электрона по отношению к направлению вектора поляризации падающей волны.

Полезно заметить, что сечение по порядку величины есть произведение квадрата атомного размера a_B^2 на константу интенсивности электромагнитного взаимодействия α и на безразмерную функцию частоты перехода и углов. Полное сечение фотоэффекта быстро падает с ростом частоты фотона,

$$\sigma = \frac{256}{3} \alpha \pi a_B^2 \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^7. \quad (14.31)$$

В области параметров, описываемых нашим расчетом (14.28), эта величина меняется на 7 порядков!

В водородоподобном ионе с зарядом ядра Ze в полученную зависимость добавляется множитель Z^2 из квадрата матричного элемента, который пропорционален

скорости атомного электрона вблизи ядра, и множитель Z^3 — от вероятности нахождения этого электрона вблизи ядра. В итоге сечение фотоэффекта растет как Z^5 . Та же зависимость ($\propto Z^5$) возникает и в тяжелых нейтральных ядрах за счет вклада ближайшей к ядру оболочки (K -оболочки). Обратите внимание, что при больших $Z \sim 80 \div 100$ область применимости используемого приближения (14.28) исчезает, поскольку слева $1 R_y$ заменяется на $Z^2 R_y$.

§ 14.8. Задачи

- Частица находилась в связанном состоянии в поле притяжения $V = -G_0\delta(x)$. В момент времени $t = 0$ яма внезапно углубилась $G_0 \rightarrow G_1 = G_0 + \Delta G$. Найти вероятность того, что частица останется в яме. Найти распределение по импульсам улетевших частиц.
- Вычислить вероятности переходов в случае удара по осциллятору, т. е. мгновенной передачи частице в осцилляторе некоторого импульса.
- Найти вероятности переходов из n -го состояния
 - бесконечно глубокой прямоугольной ямы с шириной $2a$;
 - осциллятора с частотой ω
 под действием возмущения $V(x, t) = -eExf(t)$ в первом порядке теории возмущений, приняв $t_0 = -\infty$, для случаев
 - $f(t) = e^{-(t/\tau)^2}$,
 - $f(t) = \frac{\tau^2}{\tau^2 + t^2}$,
 - $f(t) = (1 - e^{-t/\tau}) \theta(t)$,
 - $f(t) = e^{-|t|/\tau}$,
 - $f(t) = (1 + b \sin(\omega_1 t)) e^{-t/\tau} \theta(t)$,
 - $f(t) = (1 + b e^{-t/\tau} \sin(\omega_1 t)) \theta(t)$.
- Найти амплитуду перехода из основного состояния в другие состояния при расширении бесконечной прямоугольной ямы а) медленном; б) мгновенном. Определить условия применимости теории возмущений.
- Заряженный плоский ротор находится в состоянии с определенным значением $L_z = \hbar m$. Найти вероятности различных значений L_z в электрическом поле $\mathcal{E}_z = f(t)\mathcal{E}_0$.
- Рассмотреть поведение системы, в которой существенную роль играют 3 уровня 1, 2 и 3 с такими частотами переходов $\omega_{32} \equiv (E_3 - E_2)/\hbar$, $\omega_{21} \equiv (E_2 - E_1)/\hbar$, что $|\omega_{32} - \omega_{21}| = \Delta \ll \omega_{21}$, под действием периодического возмущения с частотой $\omega \approx \omega_{32} \approx \omega_{21} \gg \Delta$. (Ср. разд. 14.5.2).
- Получите угловое распределение фотоэффекта взамен (14.30) для неполяризованного света.

Глава 15

РАССЕЯНИЕ

Изучение рассеяния частиц — основной способ получения информации о взаимодействии между ними.

§ 15.1. Постановка задачи. Общие соотношения

В задаче рассеяния рассматриваются две частицы, первоначально удаленные друг от друга на большое расстояние. По этому известному начальному состоянию требуется определить возможные конечные состояния и вероятности перехода в каждое из них. К сожалению, решение одномерной задачи рассеяния (разд. 2.4.4) содержит слишком много специфических деталей, и мы не можем прямо распространить эти выводы на реальный трехмерный случай. В § 7.1 мы выяснили, что проблема столкновения двух тел, взаимодействие которых описывается потенциалом $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, сводится к задаче о движении одной частицы в поле $V(\mathbf{r})$, создаваемом некоторым (бесконечно тяжелым) притягивающим центром. Именно эту последнюю задачу мы и рассматриваем ниже.

В силу принципа суперпозиции за начальное состояние можно принять волну любого вида. Стандартный выбор, апеллирующий к простоте интерпретации, состоит в выборе начального состояния в виде стационарной плоской волны частиц с импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \equiv \hbar(0, 0, k)$ (с неизменным потоком падающих частиц, движущихся из бесконечности).

15.1.1. Амплитуда рассеяния. Сечение рассеяния

• Рассмотрим подробно *упругое рассеяние*, т. е. случай, когда взаимодействие с рассеивателем порождает расходящуюся сферическую волну, в которой импульсы частиц \mathbf{p}' направлены по радиусу от центра:

$$\mathbf{p} \equiv \hbar\mathbf{k} = (0, 0, \hbar k), \quad \mathbf{p}' \equiv \hbar\mathbf{k}' = \hbar k \frac{\mathbf{r}}{r}, \quad E = \frac{p^2}{2m}, \quad \lambda = \frac{1}{k}. \quad (15.1)$$

Угол между векторами \mathbf{p} и \mathbf{p}' называют *углом рассеяния* θ .

В нашей стационарной задаче искомые вероятности переходов — это отношения потоков рассеянных частиц к потоку падающих частиц.

Обозначим через a размер области, где существенно отличие потенциала взаимодействия $V(r)$ от нуля¹. Вдали от рассеивателя $r \gg a$, λ волновая функция должна быть суперпозицией падающей плоской волны e^{ikz} и рассеянной расходящейся сферической волны:

$$\psi = \psi_{nad} + \psi_{pac} = e^{ikz} + f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \cdot \frac{e^{ikr}}{r} \text{ при } r \gg a, \lambda. \quad (15.2)$$

Это соотношение можно рассматривать как граничное условие для уравнения Шредингера

$$(\Delta + k^2)\psi(\mathbf{r}) = (2m/\hbar^2)V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}), \quad (15.3)$$

подобное условию (2.24) для одномерной задачи рассеяния.

Введенную в (15.2) величину $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ называют **амплитудой рассеяния**. Ее исследование — основная задача теории рассеяния. (Нередко пишут $f(k, \theta)$ вместо $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ и используют тождество $kr \equiv (\mathbf{k}'\mathbf{r})$.)

■ **Поток вероятности и сечение**. Вычислим поток вероятности (2.5) на больших расстояниях, где справедлива асимптотика (15.2):

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = \mathbf{j}_{nad} + \mathbf{j}_{int} + \mathbf{j}_{pac}. \quad (15.4a)$$

Учитывая, что $\nabla e^{ikz} = i\mathbf{k}e^{ikz}$ и $\nabla[e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}/r] = [i\mathbf{k}' - \frac{\mathbf{r}}{r^3}]e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}/r$, найдем потоки падающих и рассеянных частиц \mathbf{j}_{nad} и \mathbf{j}_{pac} и интерференционный поток \mathbf{j}_{int} :

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{nad} &= \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}; & \mathbf{j}_{pac} &= \frac{\hbar\mathbf{k}'}{mr^2}|f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2; \\ \mathbf{j}_{int} &= \frac{\hbar}{2mr}(\mathbf{k} + \mathbf{k}') [f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - kr)} + f^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}')e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - kr)}]. \end{aligned} \quad (15.4b)$$

В выражении \mathbf{j}_{int} отброшены слагаемые, убывающие с ростом расстояния быстрее выписанного.

◆ **Полный поток, рассеянный в телесный угол $d\Omega$** (кроме $\theta=0$), есть

$$dJ_{pac} = j_{pac}r^2 d\Omega = (\hbar k/m)|f|^2 d\Omega.$$

Его отношение к плотности потока падающих частиц называют **дифференциальным сечением упругого рассеяния**:

$$d\sigma_{ynp} = dJ_{pac}/(j_{nad}) \equiv |f|^2 d\Omega. \quad (15.5)$$

Соответственно полное **сечение упругого рассеяния** есть

$$\sigma_{ynp} = \int d\sigma_{ynp} = \int |f|^2 d\Omega. \quad (15.6)$$

¹ Этот размер задается формой взаимодействия. Для ядерных сил $V(r) \sim e^{-r/a}/r$, где $a \sim 10^{-13}$ см.

Очень часто рассеяние бывает чисто упругим, тогда эпитет «упругое» при описании сечений отбрасывают.

▽ В задачах статистической физики рассеяние часто характеризуют величиной *транспортного сечения*

$$\sigma_{tr} = \int (1 - \cos \theta) d\sigma. \quad (15.7)$$

• Нередко часть падающих частиц после столкновения с рассеивателем меняет свою энергию или исчезает (при рассеянии электрона на атоме последний может перейти в возбужденное состояние, позаимствовав энергию у электрона; при столкновении с ионом электрон может поглотиться с образованием атома и испусканием фотона и т. п.). В стационарном режиме поглощенные частицы не накапливаются в рассеивателе, потоки этих «переродившихся» частиц — также расходящиеся волны, подобные (упругой) рассеянной волне. В таком случае величины, подобные (15.6), называют **сечениями неупругих каналов реакции**, их сумма и составляет сечение неупругого рассеяния $\sigma_{неупр}$. **Полное сечение** — это сумма

$$\sigma_{tot} = \sigma_{упр} + \sigma_{неупр}. \quad (15.8)$$

◆ В полный интерференционный поток $J_{инт} = \oint \mathbf{j}_{инт} d\mathbf{S}$ входит только амплитуда упругого рассеяния (остальные состояния не интерферируют с падающей волной). Подставим в этот интеграл определение (15.4б) и выражение для элемента телесного угла $d\mathbf{S} = r^2 d \cos \theta d\phi$:

$$J_{инт} = \frac{\hbar k}{2m} \int (1 + \cos \theta) \mathcal{N} r dr d \cos \theta d\phi, \\ \mathcal{N} = f(k, \theta) e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \mathbf{k}'\mathbf{r})} + f^*(k, \theta) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \mathbf{k}'\mathbf{r})}.$$

Выполним теперь тривиальное интегрирование по $d\phi$ и замену $x = \cos \theta$.

Математическая вставка

Рассмотрим при $r \rightarrow \infty$ интеграл

$$J = \int_{-1}^1 e^{ikrx} g(x) dx. \quad (15.9)$$

Проинтегрируем его по частям:

$$J = (1/ikr) e^{ikrx} g(x) \Big|_{-1}^1 - (1/ikr) \int_{-1}^1 e^{ikrx} g'(x) dx.$$

Повторение этой процедуры дает ряд по $1/r$. При больших r в этом ряду достаточно удерживать только первый член, что дает

$$J = (1/ikr) [e^{ikr} g(1) - e^{-ikr} g(-1)]. \quad (15.10)$$

Применяя полученный результат к функции $J_{инт}$, для которой мы обозначили

$f(k, \theta)(1 + \cos \theta) = g(\cos \theta)$, получим

$$J_{\text{инт}} = \frac{2\pi\hbar}{im} (f^*(k, \theta=0) - f(k, \theta=0)) = -\frac{4\pi\hbar}{m} \text{Im} f(k, 0). \quad (15.11)$$

■ Описание потоков частиц плоскими волнами — это, конечно, идеализация. В действительности потоки частиц образуют волновые пакеты (1.2), и физические амплитуды рассеяния представляют собой свертки обсуждавшихся выше монохроматических амплитуд с амплитудами волновых пакетов $A(\mathbf{k})$. В большинстве случаев интервал усреднения волнового пакета меньше, чем масштаб изменения амплитуды рассеяния, и эта «пакетность» не вносит ничего нового. Однако иногда амплитуда рассеяния заметно меняется при изменении волнового вектора в пределах пакета. В таком случае понятие сечения рассеяния неприменимо, наблюдаемые величины зависят от соотношения между распределением частиц в сталкивающихся сгустках и характерными длинами их волн. Это явление наблюдалось как большой эффект, например, в тормозном излучении сравнительно низкоэнергетических фотонов в ИЯФ СО РАН (Новосибирск). Ниже мы не рассматриваем эту возможность.

15.1.2. Оптическая теорема

■ Рассеяние — стационарный процесс без накопления чего-нибудь в рассеивающем центре. Поэтому должно иметь место сохранение вероятности: в случае *упругого* рассеяния число выходящих за секунду частиц должно совпадать с числом входящих частиц, а в случае *неупругого* рассеяния разумным образом рассчитанный полный расход частиц также должен совпадать с полным приходом.

Проинтегрируем полный поток j (15.46) по поверхности сферы большого радиуса. Источников при конечных r нет, поэтому должно быть $\oint \mathbf{j} d\mathbf{S} = 0$. Вклад падающего потока в этот интеграл обращается в нуль. Следовательно, должно быть

$$\oint \mathbf{j} d\mathbf{S} \equiv 0 \Rightarrow J_{\text{инт}} + J_{\text{рас}} = 0.$$

Подставим сюда полученное выражение $J_{\text{инт}}$ (15.11). В $J_{\text{рас}}$ следует учесть потоки частиц во всех конечных состояниях, т. е. $J_{\text{рас}} = (\hbar k/m)\sigma_{\text{tot}}$. В итоге получается **оптическая теорема** — важнейшее следствие сохранения вероятности:

$$\text{Im} f_{el}(k, 0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}}. \quad (15.12)$$

(Значок *el* напоминает, что слева стоит амплитуда упругого рассеяния.)

Иными словами, интерференция падающей волны с волной, рассеянной на нулевой угол («прошедшей через рассеиватель»), уменьшает поток частиц, летящих вперед. Это обеспечивает сохранение вероятности — в полной аналогии с уравнением сохранения вероятности в одномерном случае (2.25). В частности, рассеяние не может быть чисто неупругим.

При рассеянии частиц очень высокой энергии рождается много новых частиц, наблюдать их все в каждом случае практически невозможно. Поэтому не удается

прямо измерить полное сечение. В этом случае нередко оказывает помощь оптическая теорема. Для упругого рассеяния удастся определить амплитуду рассеяния на угол ноль, и отсюда с помощью (15.12) находят полное сечение.

15.1.3. Особенности рассеяния частиц со спином

При рассеянии спинорных частиц все амплитуды и сечения зависят еще и от спинов. Даже если потенциал взаимодействия не зависит от спина, при *рассеянии тождественных частиц* результат зависит от суммарного спина начального состояния. Фактически здесь проявляется обменное взаимодействие. В итоге, например, для рассеяния электрона на электроном в состоянии с полным спином 1 (спины параллельны) амплитуда рассеяния меняет знак при отражении, т. е. $f(\pi - \theta) = -f(\theta)$, а для состояния с полным спином 0 (спины антипараллельны) амплитуда рассеяния не меняется при отражении, т. е. $f(\pi - \theta) = f(\theta)$.

В общем случае еще и взаимодействие зависит от спинов (например, спин-орбитальное взаимодействие). Обычным приемом является изучение рассеяния при различных значениях начального и конечного спинов каждой из частиц.

При рассеянии строго вперед или назад (в системе центра масс) сохранение момента импульса означает, что сохраняется проекция спина на импульс (спиральность). Так, для рассеяния электрона на протоне (спины 1/2) эти проекции λ_e и λ_p могут быть равны $\pm 1/2$ (\pm) и полная спиральность есть $\lambda \equiv \lambda_e - \lambda_p$. Для рассеяния вперед отличны от нуля только амплитуды $f_{+,+ \rightarrow +,+} \equiv f_{-,- \rightarrow -,-}$, $f_{+,+ \rightarrow -,-} \equiv f_{-,- \rightarrow +,+}$ ($\lambda = 0$) и $f_{+,- \rightarrow +,-} \equiv f_{-,+ \rightarrow -,+}$ ($\lambda = \pm 1$). Равенства между амплитудами с противоположными спиральностями следуют из сохранения четности. Наличие переходов $(+, +) \rightarrow (-, -)$ означает, что для рассеяния вперед закон сохранения момента импульса допускает изменение поляризации отдельных электронов.

Если сечение рассеяния мало, то слой рассеивателей практически прозрачен для падающих частиц (как Земля для потока нейтрино). При этом, однако амплитуда рассеяния может оказаться не настолько малой, и вычисление, подобное тому, что привело нас к оптической теореме, показывает, что интерференция падающей волны с рассеянной на поляризованной мишени, различная для разных переходов, может привести к перераспределению прошедших частиц по поляризациям (как в прозрачной среде с двоякопреломлением) при сохранении полного их числа. Такое явление имеет место при прохождении поляризованных фотонов большой энергии через достаточно плотный поляризованный лазерный сгусток, фотоны которого в этом случае можно считать мишенями (Г. Л. Коткин, В. Г. Сербо).

15.1.4. Конечность полного сечения

Напомним сначала смысл понятия сечения рассеяния в классической теории. Пусть частицы, летящие из бесконечности на рассеивающий центр и имеющие прицельный параметр ρ (момент импульса $L = mv\rho$), рассеиваются на угол $\theta = \theta_{\text{кл}}$. Дифференциальное сечение рассеяния $(d\sigma/d\theta) \sin\theta d\theta = 2\pi\rho d\rho$, а соответствующее полное сечение $\sigma = \int d\sigma = 2\pi \int \rho d\rho$. (В сущности, это определение и было воспроизведено ранее в квантовом случае.) Такое определение означает, что полное сечение

есть площадь той окружности в плоскости прицельных параметров, в которой частица испытывает *хоть какое-то* рассеяние. В большинстве классических задач мы имеем дело с полями, вызывающими отклонение (хотя бы и очень небольшое) на сколь угодно больших расстояниях от рассеивателя, поэтому полные сечения в большинстве классических задач расходятся.

• Полезно оценить зависимость угла отклонения от прицельного параметра $\theta_{\text{кл}}(\rho)$ в классической задаче при больших ρ , когда действующая на частицу сила невелика. При этом движение частицы — почти прямолинейное. Тогда продольный импульс частицы $p \equiv p_z$ можно считать неизменным, а поперечный импульс p_{\perp} определяется из второго закона Ньютона через поперечную компоненту силы $dp_{\perp}/dt = -dV(r)/dr \cdot (\rho/r)$. Далее, $dt = dz/v$. Подставляя, находим приобретенный поперечный импульс и классический угол отклонения:

$$p_{\perp \text{ кл}} = -\frac{\rho}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \sim \frac{1}{v} V(\rho) \Rightarrow \theta_{\text{кл}} = \frac{p_{\perp}}{p} \sim \frac{V(\rho)}{pv} \sim \frac{V(\rho)}{E}. \quad (15.13)$$

• В квантовом случае угол рассеяния, отвечающий прицельному параметру ρ , имеет неопределенность, доставляемую соотношением неопределенностей. Соответствующая неопределенность поперечного импульса $\Delta p_{\perp} \geq \hbar/\Delta r_{\perp} > \hbar/\rho$, в итоге квантовая неопределенность угла отклонения составляет

$$\theta_{\text{quant}} \sim \Delta p_{\perp}/p_z > (\hbar/\rho p).$$

Пусть при $r \rightarrow \infty$ поле убывает с расстоянием быстрее, чем $1/r$, т. е.

$$rV(r) \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad r \rightarrow \infty. \quad (15.14)$$

(Это справедливо для ядерных сил, а также и для электростатического взаимодействия, если рассеиватель электрически нейтрален — атом или молекула.) В этом случае при больших ρ , начиная с некоторого ρ_0 , классический угол рассеяния становится меньше квантовой неопределенности этого угла $\theta_{\text{quant}} > \theta_{\text{кл}}$. При этом рассеяние заметить невозможно. Поэтому **полное сечение $\sigma \lesssim \pi \rho_0^2$, т. е. конечно.**

§ 15.2. Уравнение Шредингера в интегральной форме

От дифференциального уравнения Шредингера (15.3) полезно перейти к интегральному уравнению. Для этого запишем (15.3) в виде неоднородного уравнения

$$\Delta \psi + k^2 \psi = \Phi(r), \quad \text{где} \quad \Phi(r) = (2m/\hbar^2)V(r)\psi(r).$$

Используя далее известную функцию Грина для оператора $\Delta + k^2$ и граничное условие (15.2), запишем решение в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - (1/4\pi) \int d^3r' \Phi(\mathbf{r}') \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}.$$

Подставляя сюда выражение для $\Phi(r)$, находим интегральную форму уравнения Шредингера:

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{V(\mathbf{r}')e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \psi(\mathbf{r}').} \quad (15.15)$$

При $r \gg a$ отличим $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ от r в знаменателе можно пренебречь. Для показателя экспоненты следует выписать более аккуратное разложение. С учетом (15.1) найдем

$$k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = k\sqrt{r^2 - 2\mathbf{r}\mathbf{r}' + r'^2} \simeq k(r - \mathbf{r}\mathbf{r}'/r) = kr - \mathbf{k}'\mathbf{r}'.$$

В итоге уравнение (15.15) переходит в соотношение (15.2) с

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'). \quad (15.16)$$

Далее для упрощения выкладок мы считаем поле $V(r)$ сферически симметричным.

§ 15.3. Борновское приближение

При решении задачи рассеяния часто используют *борновскую теорию возмущений*, которая рассматривает потенциальную энергию как возмущение. Если в теории возмущений для стационарных состояний, § 5.2, в качестве невозмущенной задачи можно было *выбирать* любую точно решаемую задачу (незвизрая на погрешности в определении параметров базового гамильтониана), то в задаче рассеяния за невозмущенную следует принимать только задачу о свободном движении, которая почти всегда реализуется на достаточно больших расстояниях от рассеивателя. Этот подход разумен, если потенциал достаточно быстро убывает с расстоянием. При этом среднее значение потенциала по всему пространству обращается в нуль, в то время как среднее значение полной энергии совпадает со значением кинетической энергии частицы на бесконечности. Разумеется, это грубые соображения, реальный критерий применимости борновского приближения обсуждается ниже.

Формально борновская теория возмущений подобна теории возмущений для стационарных состояний, § 5.2, она отвечает следующей последовательности действий. Положим $V \rightarrow \varepsilon V$ и разложим волновую функцию в ряд по степеням ε

$$\psi = \psi^{(0)} + \varepsilon\psi^{(1)} + \dots + \varepsilon^k\psi^{(k)} + \dots, \quad \psi^{(0)} = e^{ikz}. \quad (15.17)$$

Затем в уравнении (15.15) приравняем вклады с одинаковыми степенями ε , и последовательно определим $\psi^{(1)}$, $\psi^{(2)}$... и соответствующие вклады в амплитуду рассеяния (15.16), а в конце перейдем к пределу $\varepsilon \rightarrow 1$.

• Чтобы получить амплитуду рассеяния в первом порядке (часто — просто *борновское приближение*), достаточно подставить под интеграл (15.16) вместо $\psi(\mathbf{r})$ невозмущенную волновую функцию $\psi^{(0)} = e^{ikz} \equiv e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. Полученная амплитуда рассеяния оказывается фурье-образом потенциала (с точностью до множителя). Она зависит только от импульса передачи $\hbar\mathbf{q}$:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \equiv f(q) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} V(\mathbf{r}), \quad (15.18a)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}, \quad q = 2k \sin(\theta/2).$$

Интегрирование по углам (в полярных координатах) дает

$$f(q) = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^{\infty} V(r) \sin(qr) r dr. \quad (15.18б)$$

Полученные соотношения показывают, что изучение амплитуды рассеяния с импульсом передачи $\hbar q$ позволяет рассмотреть детали строения потенциала на расстояниях $r \sim 1/q$.

◆ Обсудим общую картину рассеяния в этом приближении.

◇ При *небольших энергиях* (для *медленных частиц*) имеем $ka \ll 1$, и изменение фазы в области рассеивателя несущественно, под интегралом (15.18) можно положить $e^{iqr} \approx 1$ (или $\sin(qr) \approx qr$). В итоге $f(q) = f_0 \equiv -(8m/\hbar^2) \int V(r) r^2 dr$, т. е. амплитуда не зависит от угла.

◇ При *больших энергиях* (*быстрые частицы*) ($ka \gg 1$) и таких малых углах рассеяния, что $qa \equiv 2ka \sin(\theta/2) < 1$ (т. е. при малых импульсах передачи), амплитуда имеет примерно то же значение f_0 , что и для медленных частиц. С ростом угла θ (импульса передачи q) осцилляции экспоненты e^{iqr} (или синуса $\sin(qr)$) под интегралами (15.18) гасят друг друга, и амплитуда быстро убывает. Таким образом, угловое распределение имеет пик шириной $\theta \sim 1/(ka)$ вблизи направления вперед и быстро убывает с ростом угла рассеяния.

◇ *Оценим* еще поведение амплитуды рассеяния на малый угол в случае, когда $V(r) \propto r^{-n}$ при $r \rightarrow \infty$. Для больших q применимо борновское приближение, и из (15.18а) получается $f(q) \propto q^{n-3} \propto \theta^{n-3}$. Итак, дифференциальное сечение конечно при $\theta \rightarrow 0$, если $n \geq 3$, а полное сечение конечно при $n > 2$.

15.3.1. Рассеяние на потенциале Юкавы

Для многих физических задач зависимость потенциальной энергии от расстояния имеет вид

$$V(r) = g e^{-\mu r} / r. \quad (15.19)$$

Такой вид имеет, например, затравочное ядерное взаимодействие (*потенциал Юкавы*), для которого $\hbar\mu/c$ есть масса частицы — переносчика ядерных взаимодействий (π -мезона) и $1/\mu$ — радиус действия сил. Такой вид имеет и поле точечного заряда в плазме или металле с учетом экранирования ионами в плазме или из-за перераспределения зарядов в металле.

Простое вычисление интеграла (15.18б) дает

$$f(q) = -\frac{2mg}{\hbar^2(q^2 + \mu^2)}. \quad (15.20)$$

Отсюда по общим формулам получается

$$d\sigma = \left| \frac{2mg}{\hbar^2(q^2 + \mu^2)} \right|^2 d \cos \theta d\phi \Rightarrow \sigma = \frac{4\pi(2mg)^2}{\hbar^4 \mu^2 (\mu^2 + 4k^2)}. \quad (15.21)$$

15.3.2. Формула Резерфорда

Для кулоновского поля $V = -Ze^2/r$ борновское приближение непосредственно неприменимо. Чтобы решить проблему, вспомним, что практически всегда хотя бы на очень больших расстояниях поле нашего кулоновского центра экранируется другими зарядами, т. е. начинает убывать с расстоянием значительно быстрее, и борновская теория начинает работать. Для имитации этого эффекта удобно использовать амплитуду (15.20), вычисленную для потенциала Юкавы (15.19). Переход к пределу $\mu \rightarrow 0$ дает искомую амплитуду рассеяния на кулоновском центре. Получающееся дифференциальное сечение не зависит от направления сил (притяжение или отталкивание) и совпадает с классическим ответом:

$$f(q) = \frac{2mZe^2}{\hbar^2 q^2} \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{mZe^2}{2p^2 \sin^2(\theta/2)} \right)^2 \equiv \frac{Z^2 e^4}{16E^2 \sin^4(\theta/2)}. \quad (15.22)$$

Зависимость от знака взаимодействия появляется только в релятивистской теории.

Надежность использованной процедуры обеспечена тем, что детали экранирования (т. е. способ стремления μ к 0) не существенны при описании дифференциального сечения рассеяния на фиксированный угол. При очень малых углах зависимость от деталей экранирования становится существенной.

Приведем в справочных целях также результат точного решения уравнения Шредингера, взятый из [1] (при $\mu = 0$). Из-за того, что кулоновское взаимодействие убывает с расстоянием очень медленно, в этом случае сходящаяся волна появляется не только из падающей волны, но и из рассеянной. В итоге взамен (15.2) при $r \rightarrow \infty$ следует писать ($a = \hbar^2/(mZe^2)$)

$$\psi = \left[1 - \frac{i}{a^2 k^2 (\mathbf{q}\mathbf{r})} \right] e^{i[kz + \ln(\mathbf{q}\mathbf{r})/(ka)]} + \frac{f(\theta)}{r} e^{i(kr - \ln(\mathbf{q}\mathbf{r})/(ka))},$$

а амплитуда рассеяния имеет вид

$$f(\theta) = -\frac{1}{2k^2 a \sin^2(\theta/2)} \cdot \frac{\Gamma(1 + i/(ka))}{\Gamma(1 - i/(ka))}. \quad (15.23)$$

Получающееся отсюда выражение для сечения совпадает с результатом борновского приближения (15.22). Сильному изменению подверглась в сравнении с этим приближением фаза волновой функции.

15.3.3. Атомный формфактор

При упругом рассеянии электронов на атоме последний можно рассматривать как источник потенциала $\varphi(\mathbf{r})$, создаваемого средним распределением зарядов в атоме (электроны + ядро) $\rho(\mathbf{r}) = Ze\delta(\mathbf{r}) - en(\mathbf{r})$ (в уравнение Шредингера входит $V = e\varphi$).

Потенциал удовлетворяет уравнению Пуассона $\Delta\varphi = -4\pi\rho$. Построим его фурье-образ, т. е. умножим на $e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$ и проинтегрируем по r . Тогда для фурье-гармоник получается соотношение $\varphi_{\mathbf{q}} = 4\pi\rho_{\mathbf{q}}/q^2$. Поэтому

$$f(\mathbf{q}) = -\frac{2me^2}{\hbar^2 q^2} F(\mathbf{q}), \quad F(\mathbf{q}) = Z - \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} n(\mathbf{r}). \quad (15.24)$$

Функцию $F(\mathbf{q})$ называют атомным формфактором.

◆ Рассмотрим асимптотики атомного формфактора.

◇ При $qa \ll 1$ (малые углы) можно разложить экспоненту под интегралом (15.24) в ряд

$$F(q) = Z - \int d^3r n(r) [1 - i\mathbf{q}\mathbf{r} + i^2(\mathbf{q}\mathbf{r})^2/2 + \dots].$$

Первое слагаемое в ряду под интегралом дает суммарный заряд электронов Z , оно уничтожается с вкладом заряда ядра, второе слагаемое под интегралом обращается в нуль в силу сферической симметрии; по той же причине третий член имеет вид $-q^2 \langle r^2 \rangle / 6$, где $\langle r^2 \rangle = \int d^3r r^2 n(r)$. В итоге получается $F(\mathbf{q}) \approx (q^2/6) \langle r^2 \rangle$. Отсюда получается $d\sigma/d\Omega = (\langle r^2 \rangle / 3a_B)^2$.

Итак, при рассеянии на атоме полное сечение конечно.

◇ При $qa \gg 1$, т. е. при $\theta \gg (1/ka)$ быстро осциллирующий фактор под интегралом приводит к тому, что $|Z - F| \ll Z$, т. е. электрон «видит» только ядро. При этом сечение совпадает с Резерфордским.

□ *Пример* — рассеяние на атоме водорода в основном состоянии. Здесь $n(r) = |\psi_{100}(r)|^2$. Обозначив $u = (qa_B/2)^2$, имеем поэтому

$$F(q) = 1 - \frac{1}{(1+u)^2}; \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{a_B(1+u/2)^2}{(1+u)^4}; \quad \sigma = \frac{7\pi a_B e^2}{6E}.$$

◆ Описание с помощью формфактора хорошо работает до тех пор, пока можно пренебречь смещениями атомных электронов за время пролета рассеиваемого электрона. Для этого скорость рассеиваемого электрона должна быть больше характерных скоростей атомных электронов, которые по порядку величины составляют $c\alpha$ (7.206). При усреднении по ансамблю пролетевших в разное время электронов происходит усреднение по мгновенным позициям атомных электронов, и введение формфактора корректно описывает ситуацию.

Если скорость рассеиваемого электрона невелика, становится существенным движение атомных электронов за время пролета, искажаемое полем рассеиваемого электрона, и описание с помощью формфактора оказывается недостаточным.

■ Подобным образом определяются **формфакторы ядер и элементарных частиц**, описывающие их внутреннюю структуру. Само понятие формфактора отвечает приближению, в котором можно разделить эффекты, связанные со структурой мишени и рассеиваемой частицы (электрона). Такое приближение не имеет смысла при описании «структуры» электрона, участвующего только в электромагнитном взаимодействии, равно ответственном и за структуру и за рассеяние. Напротив, оно оправдано при изучении частиц, принимающих участие и в сильных (ядерных) взаимодействиях, в частности протонов и нейтронов. Понятие формфактора определяется с точностью до эффектов электромагнитного взаимодействия внутри нуклона, т. е. до величин порядка $\alpha/\pi \approx 1/400$.

Согласно общему подходу к задачам упругого рассеяния, импульс передачи должен определяться в системе центра масс сталкивающихся частиц. При изучении рассеяния электрона не слишком большой энергии на атоме или ядре (мишени) система центра масс практически совпадает с системой покоя мишени. С ростом энергии электрона это отличие становится существенным, в произвольной системе отсчета надо учесть, что энергия E' и величина импульса k' рассеянного электрона отличаются от их начальных значений E и k . В ответ входят релятивистски инвариантный квадрат импульса передачи

$$Q^2 = (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 - (E - E')^2/c^2 \quad (15.25)$$

и квадрат полной энергии сталкивающихся частиц в системе их центра масс $s = (E_e + E_A)^2 - (\mathbf{p}_e + \mathbf{p}_A)^2 c^2$. Если ядро первоначально покоилось, то $s = m_e^2 c^4 + M_A^2 c^4 + 2E_e M_A c^2$.

При изучении структуры нуклона различают электрический G_E и магнитный G_M формфакторы. Вычисление методами квантовой электродинамики при $Q^2 \gg (m_e c)^2$ дает после азимутального усреднения для дифференциального сечения упругого рассеяния электрона на нуклоне N (протоне или нейтроне)

$$d\sigma = \frac{4\pi\alpha^2 \hbar^2 M_N^2 c^6 dQ^2}{(s - M_N^2 c^4)^2 (Q^2)^2} \Phi$$

$$\Phi = G_E^2(Q^2) \left[\frac{(2s - Q^2 c^2 - 2M_N^2 c^4)^2}{4M_N c^2 + Q^2} - Q^2 \right] +$$

$$+ \frac{Q^2}{4M_N^2 c^2} G_M^2(Q^2) \left[\frac{(2s - Q^2 c^2 - 2M_N^2 c^4)^2}{4M_N c^2 + Q^2} + Q^2 \right].$$

Эксперимент показал, что с высокой точностью в очень широком диапазоне значений импульсов передачи формфакторы протона и нейтрона имеют сходное поведение (индексы p и n относятся к протону и нейтрону соответственно) (ср. (10.5))

$$G_E^p = \frac{1}{(1+v)^2}, \quad G_M^p(q^2) = \frac{g_p}{(1+v)^2}, \quad \left(v = \frac{Q^2}{(\mu c)^2} \right), \quad (15.26)$$

$$G_E^n = \frac{v}{(1+v)^2}, \quad G_M^n(q^2) = \frac{g_n}{(1+v)^2},$$

Входящая в эти формулы величина μ близка к массе ρ -мезона, $\mu c^2 \approx 770$ МэВ. Как и следовало ожидать, существование нетривиальной чисто электрической структуры нейтрона становится заметным только при не слишком маленьких значениях импульса передачи. Соответствующие пространственные распределения заряда и магнитного момента описывают «рыхлые» структуры с характерным размером $\hbar/(\mu c) \approx 0,7$ фм,

$$\rho_E^p \propto \rho_M^p \propto \rho_M^n \propto e^{-\mu cr/\hbar}, \quad \rho_E^n \propto [1 + \hbar/(\mu cr)] e^{-\mu cr/\hbar}.$$

Для тяжелых ядер характерный масштаб убывания формфактора с ростом импульса передачи составляет 60 – 70 МэВ/с, что отвечает размеру в десятков ферми.

15.3.4. Критерий применимости приближения

Борновское приближение хорошо описывает рассеяние, если вклад поправки $\psi^{(1)}$ в амплитуду значительно меньше вклада невозмущенной функции $\psi^{(0)}$, или — что то же — в области действия потенциала

$$|\psi^{(1)}| \ll |\psi^{(0)}| \quad \text{при } r < a. \quad (15.27)$$

Для конкретизации этой оценки мы будем считать, что потенциал $V(r)$ сосредоточен в области $r < a$ и исчезает при $r \geq a$, его характерное значение в области $r < a$ мы обозначаем через \bar{V} .

Разберем отдельно случаи медленных и быстрых частиц.

◇ Пусть импульс налетающей частицы невелик, ее длина волны больше характерных размеров рассеивателя $ka \ll 1$. Определим $\psi^{(1)}$ из интегрального уравнения (15.15). В области действия потенциала все экспоненты e^{ikz} , $e^{ik|r-r'|}$ можно положить равными 1, и в выражении для $\psi^{(1)}$ интеграл $\sim 2\pi a^2 \bar{V}$. Теперь условие применимости приближения (15.27) принимает вид $[m/(2\pi\hbar^2)]2\pi a^2 |\bar{V}| \ll 1$, что может быть переписано как $|\bar{V}| \ll E_{char} = \hbar^2/2ma^2$ — среднее значение потенциальной энергии меньше кинетической энергии, обусловленной локализацией внутри размера a . Это условие совпадает с условием отсутствия уровней в поле притяжения.

◇ Пусть теперь $ka \gg 1$ (частица быстро «проходит через рассеиватель»). В этом случае функцию $\psi^{(1)}$ удобно оценить уже с помощью дифференциального уравнения (15.3) $(\Delta + k^2)\psi^{(1)} = (2mV(r)/\hbar^2)e^{ikz}$. Его решение удобно искать в виде $\psi^{(1)} = g(r)e^{ikz}$. Для функции g это уравнение принимает вид $\Delta g + 2ik(\partial g/\partial z) = 2mV/\hbar^2$. По условию, k — большая величина. Поэтому в левой части достаточно удержать только второе слагаемое. Тогда наше уравнение легко решается,

$$\psi^{(1)} = -e^{ikz} (im/k\hbar^2) \int U dz \sim -e^{ikz} (im/k\hbar^2) \bar{V} a.$$

При этом условие применимости приближения (15.27) принимает простой вид $\bar{V} \ll \hbar v/a$, где скорость падающей частицы $v = \hbar k/m$. Иными словами, при больших переданных импульсах борновское приближение применимо, если неопределенность в энергии, связанная с конечностью времени пролета, больше энергии взаимодействия¹.

◇ Итак, борновское приближение применимо, если

$$|V(a)| \ll \begin{cases} \hbar^2/(ma^2) & \text{при } qa \ll 1, \\ \hbar v/a & \text{при } ka > qa \gg 1. \end{cases} \quad (15.28)$$

Типичной является ситуация, когда при больших энергиях борновское приближение справедливо для больших углов рассеяния и несправедливо при малых углах рассеяния.

¹Условие $ka \gg 1$ обеспечивает применимость квазиклассического рассмотрения, даже если величина $V(a)$ не мала по сравнению с E_{char} .

• Заметим, наконец, что в первом борновском приближении амплитуда рассеяния (15.18б) действительна. В этом приближении оптическая теорема не имеет смысла. Напомним, что в этом приближении амплитуда — порядка ε . Поэтому сечение, стоящее в правой части (15.12), — порядка ε^2 . Таким образом, для проверки оптической теоремы необходимо вычислить амплитуду по крайней мере во втором порядке по ε , т. е. во втором борновском приближении.

15.3.5. Возможное видоизменение

Борновская теория возмущений для рассеяния — частный пример подхода обычной теории возмущений, в котором вся потенциальная энергия рассматривается как возмущение. В некоторых задачах физики конденсированного состояния можно реализовать более специфический подход, наподобие § 5.2. Гамильтониан системы записывается в виде суммы $\hat{H} = \hat{H}_0 + V$, где \hat{H}_0 — невозмущенный гамильтониан с известными решениями, а V — возмущение, исчезающее на больших расстояниях. В этом случае взамен плоской волны (15.2) начальное состояние выбирается как собственное состояние невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 , а соответствующее интегральное уравнение взамен (15.3) имеет сходный вид, но с функцией Грина оператора \hat{H}_0 . Такой подход иногда называют *методом искаженных волн* (подробнее см. например в [3]).

§ 15.4. Разложение по парциальным волнам

15.4.1. Парциальные амплитуды

В § 7.1 были найдены решения уравнения Шредингера для состояний с определенными значениями энергии и момента импульса и асимптотики этих решений — произведения асимптотик радиальных волновых функций $R_{k\ell}(r)$ (7.12) на сферические гармоники $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$. В изучаемом случае потенциала со сферической симметрией волновая функция зависит лишь от r и θ , но не от φ . Поэтому разложение этого решения по сферическим гармоникам (7.3) содержит лишь $Y_{\ell 0}(\theta, \varphi) \propto P_{\ell}(\cos \theta)$. Вместе с (15.2), (7.12) это означает, что на больших расстояниях от рассеивателя

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= e^{ikz} + f(E, \theta) \cdot e^{ikr}/r = \\ &= \sum i^{-\ell} (2\ell + 1) A_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) \frac{\sin(kr - \ell\pi/2 + \delta_{\ell})}{kr}, \end{aligned} \quad (15.29)$$

где A_{ℓ} — некоторые коэффициенты, а множитель $i^{-\ell} (2\ell + 1)/k$ введен для удобства последующих вычислений.

Такое разложение особенно удобно для медленных частиц, когда фактически работает только несколько первых гармоник (см. подробнее ниже, разд. 15.5.1). Область применимости такого описания часто простирается до довольно больших энергий. Это разложение оказывается также полезным при описании резонансов в рассеянии (разд. 15.5.3).

- Соответствующее разложение для амплитуды рассеяния имеет вид

$$\begin{aligned} f(E, \theta) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) f_{\ell}(E) P_{\ell}(\cos \theta); \\ f_{\ell}(E) &= \frac{1}{2} \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta P_{\ell}(\cos \theta) f(E, \theta). \end{aligned} \quad (15.30)$$

Величины $f_{\ell}(E)$ называются **парциальными амплитудами**.

В соответствии с (15.30) и (17.19), полное сечение упругого рассеяния $\sigma_{el} \equiv \sigma$ складывается из *парциальных сечений* σ_{ℓ} :

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_{\ell}, \quad \sigma_{\ell} = 4\pi(2\ell + 1) |f_{\ell}|^2. \quad (15.31)$$

Подобным же образом определяются и парциальные сечения для разных каналов неупругого рассеяния (см. § 15.5).

□ Проиллюстрируем это понятие в классической механике для рассеяния на твердом шаре радиуса R . Здесь ρ — прицельный параметр и (при $\ell \gg 1$) момент импульса $\hbar\ell = p\rho = \hbar k\rho$. Поэтому прицельный параметр, отвечающий данному значению ℓ , есть $\rho_{\ell} = \ell/k$. Парциальное сечение $\sigma_{\ell(\text{кл})}$ определяется как площадь кольца между окружностями радиусов ρ_{ℓ} и $\rho_{\ell+1}$, т. е. классическое парциальное сечение:

$$\sigma_{\ell(\text{кл})} = \pi(\rho_{\ell+1}^2 - \rho_{\ell}^2) = \frac{\pi(2\ell + 1)}{k^2} \quad (\ell \leq kR). \quad (15.32)$$

Имея экспериментальные данные по угловому распределению рассеянных частиц, можно найти отдельные парциальные сечения и относительные фазы амплитуд. Так, если в рассеянии представлены только s- и p-волны ($\ell = 0$ и 1), то сечение имеет вид $d\sigma = [|f_0|^2 + 6\text{Re}(f_0^* f_1) \cos \theta + 9|f_1|^2 \cos^2 \theta] d\Omega$. Процедуру извлечения парциальных волн из дифференциальных сечений называют фазовым анализом.

■ При детальном анализе полезным является исследование **парциальных амплитуд в зависимости от энергии во всей комплексной плоскости энергии**. Приведем некоторые результаты.

◇ Парциальная амплитуда — аналитическая функция энергии во всей ее комплексной плоскости с разрезом по действительной оси при $E \geq 0$ и возможными полюсами при $E < 0$. *Принимают*, что физическое значение амплитуды отвечает верхнему берегу разреза.

◇ Рассматривая задачу о прямоугольной потенциальной яме, мы обнаружили связь между полюсами амплитуды рассеяния (2.26) и энергиями связанных состояний (2.20). Это частный случай общей теоремы:

Вне положительной полуоси особенности парциальной амплитуды на физическом листе — только полюса при $E < 0$. Положения этих полюсов отвечают энергиям связанных состояний с данным значением момента импульса ℓ .

◇ Аналитическое продолжение парциальной амплитуды под разрез (на второй риманов лист) может иметь полюса в точках $E_i = M_i - i\Gamma_i/2$. При небольших значениях Γ_i эти полюса отвечают резонансам в рассеянии, см. подробнее в разд. 15.5.3.

При этом M_i — масса резонанса, Γ_i — его ширина, ℓ — его спин. (На других языках эти резонансы называют квазисвязанными состояниями, виртуальными уровнями, квазиуровнями разд. 2.4.5 и т. п.)

15.4.2. Парциальные амплитуды и фазы рассеяния

• Заметим сначала, что плоская волна является решением уравнения Шредингера с равным нулю потенциалом. Ее разложение по сферическим гармоникам содержит только "синусные решения" (7.11), т. е. в разложении вида (15.29) для нее $\delta_\ell = 0$. Дополнительные множители в коэффициенте (15.29) выбраны так, чтобы в точном разложении плоской волны коэффициенты¹ A_ℓ обращались бы в 1, т. е.

$$\begin{aligned} e^{ikz} &= \sum_{\ell=0}^{\infty} (i)^{-\ell} (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta) \left(\frac{r}{k}\right)^\ell \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \frac{\sin kr}{kr} \Rightarrow \\ &\stackrel{(r \rightarrow \infty)}{\Rightarrow} \sum (2\ell+1) (i)^{-\ell} P_\ell(\cos\theta) \frac{\sin(kr - \ell\pi/2)}{2ikr} = \\ &= \sum \frac{2\ell+1}{2ikr} P_\ell(\cos\theta) [e^{ikr} - (-1)^\ell e^{-ikr}]. \end{aligned} \quad (15.33)$$

• Рассмотрим теперь разность между полной волновой функцией (15.29) и приведенным выше выражением для плоской волны, выразив "по дороге" $\sin \alpha$ через экспоненты $e^{\pm i\alpha}$

$$\begin{aligned} &\sum \frac{2\ell+1}{2ikr} A_\ell P_\ell(\cos\theta) [e^{ikr+i\delta_\ell} - (-1)^\ell e^{-ikr-i\delta_\ell}] - \sum \frac{2\ell+1}{2ikr} P_\ell(\cos\theta) [e^{ikr} - (-1)^\ell e^{-ikr}] \equiv \\ &\equiv \sum \frac{2\ell+1}{2ikr} P_\ell(\cos\theta) [(A_\ell e^{i\delta_\ell} - 1) e^{ikr} - (-1)^\ell (A_\ell e^{-i\delta_\ell} - 1) e^{-ikr}]. \end{aligned}$$

По определению (15.29) эта разность представляет собой только расходящуюся волну $f(E, \theta) e^{ikr}/r$. Поэтому коэффициент при расходящейся волне e^{-ikr}/r обращается в ноль, т. е. $A_\ell e^{-i\delta_\ell} - 1 = 0$. Отсюда следует, что $A_\ell = e^{i\delta_\ell}$, и мы получаем

$$f(E, \theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \sum \frac{2\ell+1}{2ikr} P_\ell(\cos\theta) (e^{2i\delta_\ell} - 1) e^{ikr}.$$

Сравнение с (15.30) дает в итоге

$$f_\ell(E) = \frac{e^{2i\delta_\ell} - 1}{2ik} \equiv e^{i\delta_\ell} \frac{\sin \delta_\ell}{k} \equiv \frac{S_\ell - 1}{2ik}. \quad (15.34)$$

Последним равенством мы ввели удобную для дальнейших обсуждений величину S_ℓ — отношение амплитуд расходящейся и сходящейся волн в полном решении (15.29) (с точностью до коэффициента $(-1)^{\ell+1}$).

¹ Эти коэффициенты определяются стандартным образом, с помощью интегрирования по углам выражения $P_\ell(\cos\theta) e^{ikz}$ или сравнением избранных членов степенного разложения в двух частях равенства (как это сделано в [1]).

§ 15.5. Рассеяние при наличии неупругости

Соотношения (15.34), (15.34) позволяют описывать и неупругий случай, если использовать комплексные значения фаз рассеяния δ_ℓ . Парциальное сечение упругого рассеяния (15.31) можно записать еще в виде $\sigma_{\ell(e\ell)} = \pi(2\ell + 1)|1 - s_\ell|^2/k^2$. Мы ограничимся здесь основными соотношениями.

Напомним, что парциальная амплитуда расходящейся волны отличается множителем $(-1)^{\ell+1}S_\ell$ от соответствующей амплитуды в сходящейся волне. Если поглощения нет, то в силу сохранения вероятности $|S_\ell| = 1$. Если есть поглощение, то $|S_\ell| < 1$, и величина $1 - |S_\ell|^2$ описывает уменьшение потока частиц в расходящейся волне по сравнению со сходящейся. Действительно,

$$J_{in} = -\frac{\pi\hbar k}{m} \sum (2\ell + 1); \quad J_{out} = \frac{\pi\hbar k}{m} \sum (2\ell + 1)|S_\ell|^2.$$

Неупругое сечение — разность этих интегралов, деленная на падающий поток j_{inc} , а полное сечение $\sigma_{tot} = \sigma_{el} + \sigma_{in}$. Окончательно

$$\begin{aligned} \sigma_{el} &= \sum \sigma_{\ell(e\ell)}, & \sigma_{\ell(e\ell)} &= \pi(2\ell + 1)(|1 - S_\ell|^2)/k^2; \\ \sigma_{in} &= \sum \sigma_{\ell(in)}, & \sigma_{\ell(in)} &= \pi(2\ell + 1)(1 - |S_\ell|^2)/k^2; \\ \sigma_{tot} &= \sum \sigma_{\ell(tot)}, & \sigma_{\ell(tot)} &= 2\pi(2\ell + 1)(1 - \text{Re}S_\ell)/k^2. \end{aligned} \quad (15.35)$$

Итак,

- ▽ при $S_\ell = 1$ нет ни поглощения, ни рассеяния,
- ▽ при $|S_\ell| = 1$ есть только рассеяние и нет поглощения,
- ▽ при $S_\ell = 0$ поглощение и рассеяние одинаково сильны.

Если рассеяние чисто упругое, то все фазы действительны и

$$\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2}(2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell. \quad (15.36)$$

◆ Соотношения (15.34), (15.35) позволяют вычислить и мнимую часть парциальной амплитуды $\text{Im}f_\ell(k) = (1 - \text{Re}S_\ell)/2k$. Сравнение с (15.35) дает новую форму оптической теоремы:

$$(2\ell + 1)\text{Im}f_\ell(k) = \frac{k}{4\pi}\sigma_{\ell(tot)}(k). \quad (15.37)$$

В частности, для упругого рассеяния в силу (15.34) можно записать

$$\text{Im}f_\ell = k|f_\ell|^2. \quad (15.38)$$

Перепишем это соотношение в другом виде: $\text{Im}(1/f_\ell) = -k$. Такая запись означает, что парциальную амплитуду можно выразить через некоторую действительную функцию g_ℓ в виде

$$f_\ell = \frac{1}{g_\ell - ik}. \quad (15.39)$$

Такое представление полезно при некоторых анализах.

15.5.1. Упругое рассеяние медленных частиц

При $ka \ll 1$ для $\ell \neq 0$ прицельные параметры велики, $\rho_\ell = \ell/k \gg a$, поэтому лишь s -волна ($\ell = 0$) может давать заметное рассеяние. Таким образом, угловое распределение рассеянных частиц изотропно.

Если потенциал достаточно быстро убывает с расстоянием, то при $k \rightarrow 0$ фазы рассеяния малы, т. е. вклады высших гармоник подавлены:

$$\delta_\ell \propto k^{2\ell+1} \Rightarrow f_\ell \propto k^{2\ell}. \quad (15.40a)$$

Напомним, что фаза рассеяния безразмерна. Единственный размерный фактор, присутствующий в задаче помимо k , — характерный размер поля a . Поэтому выписанные оценки уточняются следующим образом:

$$\delta_\ell \propto (ka)^{2\ell+1} \Rightarrow f_\ell \propto a(ka)^{2\ell}. \quad (15.40b)$$

Чтобы получить эти оценки в случае, когда применимо еще и борновское приближение¹, подставим в (15.30) формулу (15.18б), где разложим $\sin qr$ в ряд, и воспользуемся тождеством $q^2 = 2k^2(1 - \cos \theta)$. Обозначив $\cos \theta = z$, получаем

$$f_\ell(k) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int r^2 dr V(r) dc P_\ell(z) \sum_k \frac{(-2k^2 r^2 (1-z))^n}{(2n+1)!}. \quad (15.41)$$

Функции $P_\ell(z)$ — полиномы (Лежандра) по z степени ℓ , ортогональные друг другу на отрезке $(-1, 1)$. Это означает, что вклад в f_ℓ дают только те слагаемые ряда, номер которых $n \geq \ell$. При $k \rightarrow 0$ это означает, что $f_\ell \propto k^{2\ell}$, что подтверждает утверждение (15.40a).

Такое вычисление дает правильный ответ, если интеграл (15.41) сходится для всех n . Это справедливо для ядерных сил, убывающих на больших расстояниях по закону $e^{-(r/a)}/r$. Межмолекулярные силы убывают обычно медленнее — по степенному закону $V \sim 1/r^\gamma$. Для таких потенциалов зависимость (15.40a) имеет место только при $\ell < (\gamma - 3)/2$. Для фаз с $\ell > (\gamma - 3)/2$ оценка того же интеграла дает зависимость $\delta_\ell \propto k^{\gamma-2}$.

Итак, при низких энергиях $f_\ell \propto k^{2\ell}$. В частности, при низких энергиях основной вклад дает s -волна, для которой $\delta_0 = ak$. Величина a называется *длиной рассеяния*. При этом в соответствии со сказанным в начале раздела

$$d\sigma = a^2 d\Omega, \quad \sigma = 4\pi a^2. \quad (15.42)$$

15.5.2. Рассеяние быстрых частиц на сером шаре

Для ряда физических задач грубую картину рассеяния неплохо описывает картина дифракционного рассеяния быстрых частиц на частично поглощающем (сером) шаре радиуса a при $ka \gg 1$ с коэффициентом поглощения ρ (значение $\rho = 1$ отвечает черному шару, при $\rho = 0$ рассеиватель незаметен). Эта задача очень похожа задаче о дифракции плоской волны на сером (полупрозрачном) шаре.

¹Общий случай требует лишь небольших уточнений.

При $ka \gg 1$ разумное приближение дает квазиклассическое приближение. Момент импульса частицы, движущейся с прицельным параметром ρ , есть $L = p\rho \equiv \hbar k\rho$. Поэтому значения момента, участвующие в соударениях, $\ell \lesssim \ell_0 = ka$. При $\ell \gg \ell_0$ частицы не сталкиваются с рассеивателем, соответствующие $S_\ell = 1$. При $\ell \gg \ell_0 = ka$ частицы не сталкиваются с шаром, соответствующие $S_\ell = 1$. При $\ell \ll \ell_0$ часть потока частиц поглощается (их доля составляет ρ), а отношение амплитуд расходящейся и сходящейся волн в полном решении составляет $S_\ell = 1 - \rho$ (ср. определение (15.34)). (Для полного поглощения – черный шар – $S_\ell = 0$.) Область $\ell \approx \ell_0$ не дает большого вклада в сечение. Итак, в соответствии с (15.34) мы получаем в хорошем приближении чисто мнимую амплитуду упругого рассеяния

$$f(k, \theta) = \frac{i}{2k} \rho \sum_{\ell=0}^{\ell_0} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta). \quad (15.43)$$

Найдем сначала полное и упругое сечения. Для этого сначала выпишем мнимую часть амплитуды (упругого) рассеяния вперед с помощью (17.18):

$$\text{Im} f(k, 0) = \frac{1}{2k} \rho \sum_{\ell=0}^{\ell_0} (2\ell + 1) = \frac{1}{2k} \rho \ell_0^2 \approx \frac{\rho}{2} ka^2.$$

Использование оптической теоремы (15.12) дает теперь полное сечение

$$\sigma_{tot} = 2\pi \rho a^2, \quad (15.44)$$

Результат имеет правильный порядок величины πa^2 , но как появился множитель 2ρ (для черного шара это был бы не очень понятный множитель 2)? Чтобы понять это, воспользуемся соотношениями (15.35). Они дают

$$\sigma_{el} = \sigma_{in} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\ell_0} \rho^2 (2\ell + 1) = \frac{\pi \ell_0^2 \rho^2}{k^2} = \pi \rho^2 a^2. \quad (15.45)$$

Точно так же получается сечение упругого рассеяния $\sigma_{in} = \pi(2\rho - \rho^2)a^2$. Итак, в нашей модели упругое сечение значительно меньше неупругого, и только для черного шара упругое и неупругое сечения равны¹:

$$\frac{\sigma_{el}}{\sigma_{tot}} = \frac{\rho}{2}. \quad (15.46)$$

Перейдем теперь к описанию углового распределения упругого рассеяния. При больших ℓ в выражении для амплитуды суммирование можно заменить интегрированием (17.21). Тогда получается

$$f(k, \theta) \approx \frac{i}{k} \rho \int_0^{\ell_0} \ell J_0(\ell\theta) d\ell = \rho \frac{ia}{\theta} J_1(ka\theta).$$

¹Чтобы получить в такой модели относительно небольшую неупругость, надо использовать комплексные S_ℓ .

Поэтому (с учетом (17.22))

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = |f|^2 \approx \rho^2 a^2 \begin{cases} (ka)^2/4 & \text{при } \theta \ll 1/ka, \\ \frac{2 \sin^2(ka - \pi/4)}{\pi ka \theta^2} & \text{при } \theta \gg 1/ka. \end{cases}$$

Иными словами, сечение упругого рассеяния велико лишь в области малых углов $\theta \leq (1/ka)$.

Полученная картина при $\rho = 1$ (черный шар) неплохо описывает, например рассеяние нейтронов с $E = 100$ МэВ на тяжелом ядре радиуса $a \sim 10^{-12}$ см, при этом $ka \sim 10$. Эта картина дает грубое описание и для рассеяния адронов (протонов, нейтронов, антипротонов) друг на друге при больших энергиях (в сотни и тысячи ГэВ), эти столкновения преимущественно неупругие, опыт дает для них $\rho \approx 0,4$ и $a \sim 0,6$ Фм.

Для классических же частиц дифракция практически не наблюдаема. Так, при $m \sim 1$ г и $v \sim 1$ см/с углы дифракции на шаре радиуса $a \sim 1$ см — порядка $\theta \sim (\hbar/mva) \sim 10^{-27}$. Увидеть это рассеяние можно было бы лишь на расстояниях $a\theta^{-1} \sim 10^{27}$ см (размер видимой Вселенной).

15.5.3. Резонансное рассеяние

Выясним теперь, как проявляются в рассеянии квазистационарные состояния, подобные изучавшимся в разд. 2.4.5. Рассмотрим для этого амплитуду как функцию энергии E в комплексной плоскости энергии.

Перепишем $R_{k\ell}(r) \sim \sin(kr - \pi\ell/2 + \delta_\ell)/r$ в виде

$$R_{k\ell}(r) \rightarrow \frac{C}{r} [a_\ell(E)e^{ikr} + a_\ell^*(E)e^{-ikr}], \\ a_\ell(E) = -ie^{i(\delta_\ell - \pi\ell/2)}.$$

При этом в соответствии с (15.34) парциальная амплитуда есть

$$f_\ell(E) = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_\ell} - 1) = \frac{1}{2ik} \left[\frac{a_\ell(E)}{a_\ell^*(E)} (-1)^\ell - 1 \right]. \quad (15.47)$$

Пусть в рассматриваемом поле $V(r)$ возможно квазистационарное состояние при $E = E_0 = E_r - i\Gamma/2$, и $\Gamma \ll E$. Тогда асимптотика $R_{k\ell}(r)$ при данной энергии должна содержать только расходящуюся волну¹, т. е. должно быть $a_\ell^*(E_0) = 0$. Тогда простейшая аппроксимация вблизи резонанса имеет вид $a_\ell^*(E) \approx \beta_\ell^*(E - E_0) \equiv \beta_\ell^*(E - E_r + i\Gamma/2)$. Иными словами, парциальная амплитуда имеет полюс при $E = E_0^* = E_r + i\Gamma/2$ (формула Брейта–Вигнера):

$$f_\ell(E) = \frac{1}{2ik} \left[e^{2i\delta_{\ell 0}} \frac{E - E_r - i\Gamma/2}{E - E_r + i\Gamma/2} - 1 \right], \\ \left(e^{2i\delta_{\ell 0}} = (-1)^\ell \frac{\beta_\ell}{\beta_\ell^*} \right). \quad (15.48)$$

¹Именно такое условие использовалось в разд. 2.4.5 для определения ширины квазиуровня Γ в заданном поле.

При этом $\delta_\ell = \delta_{\ell 0} - \arctg g[\Gamma/2(E - E_r)]$, где $\delta_{\ell 0}$ — фаза рассеяния вдали от резонанса. При прохождении через резонанс фаза рассеяния изменяется на π .

Обычно фаза $\delta_{\ell 0}$ невелика. В этом случае парциальное сечение имеет резонансную зависимость от энергии, с "куполлом" при $E = E_r$ и (ср. (2.30))

$$\sigma_\ell = \frac{\pi}{k^2} \frac{(2\ell + 1)\Gamma^2}{(E - E_r)^2 + \Gamma^2/4}. \quad (15.49a)$$

Однако, наличие даже постоянной, но не очень маленькой нерезонансной фазы сдвигает положение максимума и даже меняет его форму. Если, в частности, $\delta_{\ell 0} = \pi/2$, зависимость сечения от энергии имеет совсем другой вид, с двумя максимумами и нулем при $E = E_r$:

$$\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2} \frac{(2\ell + 1)(E - E_r)^2}{(E - E_r)^2 + \Gamma^2/4}. \quad (15.49б)$$

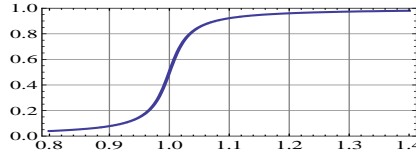


Рис. 15.1. Зависимость фазы (15.47) от E вблизи резонанса при $|\delta_{\ell 0}| \ll 1$.

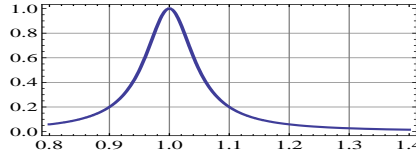


Рис. 15.2. Зависимость парциального сечения σ_ℓ от E вблизи резонанса при $|\delta_{\ell 0}| \ll 1$.

Поэтому наблюдение пика в сечении при некоторой энергии E_p не говорит точно о резонансе при энергии E_r . Резонанс скорее всего есть, и его положение близко к E_p . Чтобы найти истинные параметры резонанса из данных по рассеянию, необходимо выполнить довольно громоздкий анализ, включающий и определение медленно меняющейся фазы $\delta_{\ell 0}$.

▽ Чтобы выяснить смысл величины β_ℓ , вернемся к нестационарной задаче, изучавшейся в разд. 2.4.5. При $E = E_r - i\Gamma/2$ радиальная волновая функция на больших расстояниях есть

$$R_{k\ell}(r) = \beta_\ell^*(-i\Gamma) e^{ikr}/r.$$

Если $R_{k\ell}(r)$ нормирована во внутренней области на единицу, то полный поток в расходящейся волне $v\Gamma^2|\beta_\ell|^2$ должен равняться вероятности распада Γ/\hbar . Отсюда

$$|\beta_\ell|^2 = \frac{1}{\hbar v \Gamma}.$$

◇ Соотношение (15.48) представляет собой ясную иллюстрацию общего утверждения, содержащегося в § 15.4.1 о том, что резонансам в рассеянии отвечают полюса в нижней полуплоскости комплексной энергии.

15.5.4. Некоторые особенности рассеяния заряженных частиц

Кулоновское поле недостаточно быстро убывает с расстоянием, и асимптотическое условие (15.2) здесь записать нельзя. Прямое решение уравнения Шредингера

дает в этом случае взамен (7.12) совсем другую асимптотику парциальной волны (см. например [1])

$$R_{k\ell} \approx \frac{2}{r} \sin \left(kr + \frac{1}{ka_B} \ln(kr) - \frac{\pi}{2} \ell + \delta_{\ell c} \right), \quad (15.50)$$

$$\delta_{\ell c} = \arg \Gamma(\ell + 1 - i/k).$$

Наиболее важной новой чертой здесь является появление медленно меняющейся величины $\ln(kr)$ под аргументом синуса («кулоновская фаза»).

В чисто кулоновской задаче модуль амплитуды рассеянной волны (и сечение) описываются формулой Резерфорда (разд. 15.3.2), а фаза, получающаяся из (15.50) не имеет ничего общего с результатом Борновского приближения.

Ситуация меняется в условиях, когда наряду с электростатическими действуют другие, короткодействующие силы. В предположении слабости этих сил можно говорить грубо, что амплитуда, получающаяся из короткодействующей силы, складывается с кулоновской. В итоге наблюдаемое сечение начинает зависеть от величины $\ln(kr)$, взятой на масштабе действия этих короткодействующих сил. Наблюдение этой зависимости доставляет новые сведения о характере короткодействующих сил. Именно это является одной из задач исследования упругого протон-протонного рассеяния при больших энергиях и столь малых углах рассеяния, что величина квадрата переданного импульса (15.25) близка к квадрату обратного радиуса действия ядерных сил $(\hbar/a)^2 \approx (m_{\pi}c)^2$.

§ 15.6. Столкновения тождественных частиц

Описание рассеяния тождественных частиц начинается с разделения переменных на движение центра масс и на относительное движение §7.1. Пространственная волновая функция относительного движения симметрична относительно перестановки частиц ($\theta \leftrightarrow \pi - \theta$), если суммарный спин системы четный, пространственная волновая функция относительного движения антисимметрична относительно перестановки частиц, если суммарный спин системы нечетный (12.6). Поэтому вместо асимптотического разложения (15.2) следует писать

$$\psi = \psi_{na\partial} + \psi_{pac} = e^{ikz} + [f(\mathbf{k}, k') \pm f(\mathbf{k}, -k')] \cdot \frac{e^{ikr}}{r} \text{ при } r \gg a, \lambda. \quad (15.51)$$

При этом дифференциальное сечение содержит обменное слагаемое $Re(f^*(\theta)f(\pi - \theta))$:

$$d\sigma = |f(\theta) \pm f(\pi - \theta)|^2 d\Omega. \quad (15.52)$$

§ 15.7. Ограничения подхода

Обсудим теперь некоторые ограничения развитых выше подходов к изучению реальных физических задач.

- В ряде случаев перестает работать концепция потенциала, не зависящего от реакции и от времени. Простейший пример — рассеяние электрона на атоме (изучавшееся в (15.3.3)). При более точном подходе следовало бы изучать рассеяния

на отдельных электронах, учесть возможные возбуждения электронных состояний в атоме и т.п. Обычно для атомных систем это дает лишь небольшие поправки, которые важны только в некоторых специальных задачах. В теории столкновений элементарных частиц концепция потенциала, даже зависящего от времени, не работает очень часто, здесь оказывается важным рождение и поглощение частиц в промежуточных состояниях, для этих задач разработаны другие подходы.

- Выше задачи рассеяния рассматривались в предположении, что начальное (и конечное) состояния — плоские волны. В действительности начальные и конечные состояния реализуются как некоторые волновые пакеты — суперпозиции плоских волн с некоторым разбросом импульсов Δp . В большинстве задач отличие волновых пакетов от плоских волн не приводит к заметным эффектам. Однако есть класс задач, в которых это отличие может приводить к серьезным наблюдаемым эффектам. Так, амплитуда тормозного излучения при рассеянии ультрарелятивистских электронов на встречных протонах или позитронах в коллайдере очень сильно меняется уже при ничтожном изменении переданного импульса, меньшем Δp . При этом в конечном состоянии невозможно различить электрон, испытавший рассеяние, обусловившее тормозное излучение и электрон, который не испытал рассеяния, а просто имеет немного другой импульс в пределах пакета — возникает интерференция вкладов разных электронов — происходит переход от суммы излучений отдельных электронов к излучению сгустка электронов как целого (наподобие громадного ядра).

- Волновой пакет для заряженной частицы может содержать еще несколько фотонов небольшой энергии (*сопровождающие фотоны*) так, что квадрат эффективной массы (квадрат суммарного четырехмерного импульса, деленный на c^2) этой системы лишь немного отличается от m^2 . Это приводит к наблюдаемым эффектам. Если, например, вычислять сечение эффекта Комптона ($\gamma e \rightarrow e\gamma$) с учетом поправок второго Борновского приближения, то получается бессмысленное отрицательное расходящееся сечение («инфракрасная катастрофа»). Оно становится конечным, если учесть сопровождающие фотоны в конечном состоянии (*метод Блоха-Нордсика*). В указанном приближении однозначный физический смысл имеет лишь сумма сечений однократного ($\gamma e \rightarrow e\gamma$) и двукратного ($\gamma e \rightarrow e\gamma\gamma$) Комpton-эффекта. При вычислении приходится фактически вводить сопровождающий фотон небольшой энергии ε . При $\varepsilon \ll m_e c^2$ эта энергия из ответа выпадает.

§ 15.8. Некоторые черты процессов при очень больших энергиях

При очень больших энергиях $E \gg mc^2$ мы вступаем в область, где нерелятивистская квантовая механика перестает быть применимой, а общая релятивистская квантовая механика просто не существует ввиду отсутствия предмета исследования. Взамен этого разработана теория элементарных взаимодействий с учетом специфики каждого из них, кратко обсуждаемая в Приложении ??.

Перечислим характерные свойства некоторых процессов взаимодействия элементарных частиц при высоких энергиях, различные для разных типов частиц.

Столкновения сильно взаимодействующих (ядерных) частиц (например, про-

тонов и π -мезонов с протонами и антипротонами). Полные сечения этих процессов по порядку величины составляют $\pi(\hbar/m_\pi c)^2 \sim (20 \div 60) \times 10^{-27} \text{ см}^2$, они медленно растут с ростом энергии. Примерно 20 % этого сечения приходится на упругое рассеяние (ср. (15.46)), остальное — множественное рождение частиц, средняя множественность числа рожденных частиц растет грубо говоря как логарифм энергии. Большая часть рожденных частиц имеет не очень большие поперечные импульсы порядка $(2 \div 3)m_\pi c \sim 300 \div 500 \text{ МэВ}/c$. Важную информацию об элементарных взаимодействиях на расстояниях $\sim \hbar/p_\perp$ доставляет изучение *струй частиц* с большим поперечным импульсом $p_\perp \sim \sqrt{mE}$.

Столкновения фотонов с протонами по большей части выглядят подобно столкновениям сильно взаимодействующих частиц друг с другом. Сечения взаимодействия в $1/\alpha = 137$ раз меньше, да взамен упругого рассеяния выступает рождение нейтральных векторных мезонов ρ , ω , ϕ .

Столкновения электронов с протонами могут быть поняты как взаимодействия протонов с фотонами, получающимися при движении быстрого электрона. Соответствующие сечения еще в $1/\alpha = 137$ раз меньше. Изучая их зависимость от квадрата переданного электрону 4-импульса, удастся исследовать структуру протона на малых расстояниях.

Столкновения электронов с позитронами исследуются на ускорителях со встречными пучками — коллайдерах (с энергией сталкивающихся частиц E). В большинстве случаев вся эта энергия расходуется на рождение частиц на очень малых расстояниях $\sim \hbar c/E$. К сожалению, сечения этих процессов быстро падают с ростом энергии $\sim \alpha^2(\hbar c/E)^2$.

§ 15.9. Задачи

- Получить в борновском приближении дифференциальное сечение рассеяния и указать критерий применимости для потенциалов
 - $V(r) = (g/r)e^{-\mu r}$ (Юкава);
 - Are^{-br} ;
 - $V = \begin{cases} -U & \text{при } |r| < a, \\ 0 & \text{при } |r| > a \end{cases}$ (прямоугольная яма).
- Вычислить сечение упругого рассеяния быстрых электронов атомом водорода в основном состоянии.
- Быстрый электрон упруго рассеивается протоном, находящимся в основном состоянии в поле $U = m\omega^2 r^2/2$. Вычислить дифференциальное сечение.
- Для сферической потенциальной ямы (барьера) с радиусом R найти сечение рассеяния
 - в борновском приближении;
 - для медленных частиц (включая и резонансное рассеяние — ср. [7], задача 13.35).
- Найти фазы для рассеяния в поле $V(r) = a/r^2$ при $a > 0$. При $ma/\hbar^2 \ll 1$ найти дифференциальное и полное сечения.
- Найти дифракционную картину, возникающую при упругом рассеянии электронов в газе двухатомных молекул. Расстояние между атомами в молекуле a . Потенциал,

создаваемый каждым атомом, имеет вид $V(r) = (\lambda/r)e^{-r/r_0}$. Предполагается, что $\lambda \ll \hbar^2/ma^2$; молекулы ориентированы хаотично. Для $a \approx 3r_0 \approx 3 \text{ \AA}$, оценить, при каких энергиях можно наблюдать эту картину. Рассмотреть случаи больших и малых переданных импульсов.

Разобрать ту же задачу, не конкретизируя вид потенциала $V(r)$. Выяснить, как по виду угловой зависимости дифференциального сечения можно находить a .

7. Получите амплитуду рассеяния во втором борновском приближении.
8. Вычислить в борновском приближении фазы рассеяния для потенциала $U(r) = U_0 e^{-r^2/a^2}$.
9. Найти сечение рассеяния медленных частиц (s - и p - волновые вклады) на потенциале $V(r) = -G\delta(r - a)$. Рассмотреть случай, когда в таком поле есть связанное состояние
10. Вычислить фазы для рассеяния в поле $U(r)$ в борновском приближении.

Глава 16

ИСПУСКАНИЕ И ПОГЛОЩЕНИЕ ИЗЛУЧЕНИЯ

Рассмотрим теперь *процессы излучения* электромагнитных волн и их *поглощения*. Последовательное изучение таких процессов составляет предмет квантовой электродинамики.

§ 16.1. Излучение и поглощение света

В этом разделе мы рассмотрим атомную систему с двумя уровнями u и d ($E_d < E_u$) (состояния $|\psi_u\rangle$ и $|\psi_d\rangle$), которая находится в среде, где плотность энергии электромагнитного данной частоты $U(\omega)$ не зависит от направления распространения волны. Обозначим через $N(u)$ и $N(d)$ числа атомов в состояниях u и d соответственно. В этой системе переходы с нижнего на более высокий уровень $d \rightarrow u$ происходят только под действием внешнего поля (поля излучения), это вынужденные переходы. В то же время переходы $u \rightarrow d$ могут происходить и под действием поля излучения (*вынужденные переходы*) и самопроизвольно (*спонтанные переходы*). Каждый переход сопровождается излучением или поглощением фотона с энергией $\hbar\omega_{ud} = E_u - E_d$, импульс которого $\hbar\mathbf{k}$, причем $k = \omega_{ud}/c$, и вектор поляризации $\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda}$.

Выполним сначала некоторые оценки на примере излучения при изменении главного квантового числа на единицу ($n_u - n_d = 1$) в атоме водорода. Для таких атомов характерный размер области взаимодействия определяется наименьшим характерным размером для состояния d — радиусом $a_B n_d^2$, соответствующая характерная скорость $v = c\alpha/n_d$. Произведение

$$ka = \frac{E_u - E_d}{\hbar c} a = 1R_y \frac{1}{\hbar c} \left(\frac{1}{n_d^2} - \frac{1}{n_d^2} \right) a_B n_d^2 \sim \frac{e^2}{2\hbar c} \cdot \left(\frac{2}{n_d} \right) \sim \frac{\alpha}{n_d} \sim \frac{\langle v \rangle}{c}.$$

Здесь $\alpha \approx 1/137$ — постоянная тонкой структуры, в вычислениях мы использовали выражения (7.14). Вообще, оценка

$$ka \sim v/c \ll 1. \quad (16.1)$$

справедлива для спонтанного излучения любой системы с нерелятивистским движением частиц.

16.1.1. Коэффициенты Эйнштейна

Эйнштейн предложил записывать соответствующие скорости переходов (числа переходов в секунду) следующим образом.

Скорость вынужденных переходов $d \rightarrow u$ есть

$$r_{d \rightarrow u} N(d) = B_{du} U(\omega_{ud}) N(d). \quad (16.2a)$$

Скорость переходов $u \rightarrow d$ (вынужденных и спонтанных) есть

$$r_{u \rightarrow d} N(u) = [A_{ud} + B_{ud} U(\omega_{ud})] N(u). \quad (16.2b)$$

Введенные здесь коэффициент поглощения B_{du} , коэффициент вынужденного испускания B_{ud} и коэффициент спонтанного испускания A_{ud} называют *коэффициентами Эйнштейна*.

Чтобы найти соотношение между ними, выразим плотность энергии через число фотонов газа излучения (12.30) и запишем отношение скоростей переходов в расчете на один атом:

$$\frac{r_{d \rightarrow u}}{r_{u \rightarrow d}} = \frac{B_{du} n_{\mathbf{k}\lambda} \hbar \omega^3 / (\pi^2 c^3)}{A_{ud} + B_{ud} n_{\mathbf{k}\lambda} \hbar \omega^3 / (\pi^2 c^3)}. \quad (16.3)$$

В согласии с (4.11), (12.29), для состояния поля с n фотонами данного типа матричный элемент излучения, т. е. добавления еще одного фотона, домножается на $\langle n+1 | \hat{b}^+ | n \rangle = \sqrt{n+1}$, а матричный элемент поглощения — на $\langle n-1 | \hat{b} | n \rangle = \sqrt{n}$. Поэтому вероятности излучения и поглощения связаны соотношением

$$\frac{\omega_{\text{пол}}}{\omega_{\text{изл}}} = \frac{r_{d \rightarrow u}}{r_{u \rightarrow d}} = \frac{n}{n+1}.$$

Сравнивая с (16.3), получим *соотношения Эйнштейна*:

$$B_{ud} = B_{du}, \quad A_{ud} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot B_{ud}. \quad (16.4)$$

Мы получили, в частности, что *коэффициенты вынужденного излучения и поглощения совпадают*. Это позволяет далее не выписывать индексы ud и du у коэффициентов Эйнштейна.

16.1.2. Вероятность излучения. Подход Ферми

Идея подхода Ферми состоит в том, что скорость **поглощения** света атомной системой несомненно описывается в подходе разд. 14.6.2, см. (14.27). Из выражения для этой скорости с помощью (16.4) отыскивается скорость спонтанного излучения. При таком подходе не возникает необходимости использовать аккуратные формулы квантования электромагнитного поля.

Итак, пусть на рассматриваемую атомную систему падает достаточно длинный пакет волн электромагнитного поля, в среднем поляризованных вдоль оси z , с напряженностью электрического поля \mathcal{E} и с частотой ω . Мы рассмотрим переходы между уровнями u и d атомной системы в поле этого пакета. Считая нашу систему одноэлектронной, запишем возмущение в виде $V(t) = e\mathcal{E}z \cos \omega t$. Это частный случай периодического возмущения (14.10) с $F = e\mathcal{E}z/2$.

Волновой пакет не бывает монохроматическим, его разброс по частотам описывается спектральной плотностью $\bar{\rho}(\omega)$. Поэтому выражение для скорости переходов в непрерывный спектр (14.27) применимо с минимальными изменениями для описания $u \leftrightarrow d$ переходов в поле этого пакета. В частности, вероятность перехода $d \rightarrow u$ есть (ср. (14.27))

$$\frac{e^2 \mathcal{E}^2 |z_{ud}|^2}{4\hbar^2} \cdot \frac{4 \sin^2 \left(\frac{\omega_{ud} - \omega}{2} t \right)}{(\omega_{ud} - \omega)^2} dN \Rightarrow \pi t \frac{e^2 \mathcal{E}^2 |z_{ud}|^2}{2\hbar^2} \delta(\omega_{ud} - \omega) \bar{\rho}(\omega) d\omega \frac{d\Omega}{4\pi}.$$

Подставляя сюда $\mathcal{E}^2 = 8\pi \cdot U$, найдем

$$r_{d \rightarrow u} = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar^2} |z_{ud}|^2 \cdot U(\omega_{ud}) \frac{d\Omega}{4\pi}.$$

Зависимость матричного элемента z_{ud} от углов определяется множителем $\cos \theta$. Усреднение по углам для сферически симметричного распределения электрона в атоме дает поэтому множитель $1/3$. Окончательно, получаем скорость переходов с поглощением падающей (вынуждающей) волны на один атом в состоянии d (вероятность вынужденного излучения за единицу времени на один атом):

$$r_{d \rightarrow u}^{(1)} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} \langle |\mathbf{r}_{ud}|^2 \rangle \cdot U(\omega_{ud}). \quad (16.5)$$

• Используя теперь (12.30) и (16.4), получим **вероятность спонтанного дипольного излучения** за единицу времени (скорость излучения) и интенсивность этого излучения $I(\omega)$ — среднюю энергию, излучаемую за секунду:

$$\begin{aligned} r^{\text{спонт}} &= \frac{4e^2 \omega^3}{3\hbar c^3} \langle |\mathbf{r}_{ud}|^2 \rangle \equiv \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} \langle |\mathbf{d}_{ud}|^2 \rangle, \\ I(\omega) &= r^{\text{спонт}} \hbar \omega = \frac{4e^2 \omega^4}{3c^3} \langle |\mathbf{r}_{ud}|^2 \rangle \equiv \frac{4\omega^4}{3c^3} \langle |\mathbf{d}_{ud}|^2 \rangle, \end{aligned} \quad (16.6)$$

где $\mathbf{d} = e\mathbf{r}$ — оператор электрического дипольного момента (здесь принято, что ядро расположено в начале координат). Последние выражения естественным образом обобщаются на многоэлектронные системы, для которых $\mathbf{d}_{ud} = \sum e_i \mathbf{r}_{i,ud}$.

Эти формулы описывают переходы между атомными состояниями, обусловленные взаимодействием внешнего поля с электрическим дипольным моментом атома. Их естественно называют **электрическими дипольными переходами**.

16.1.3. Излучение света. Квантованные поля

В этом разделе мы опишем излучение света прямо, не начиная с поглощения. Мы получим полное описание, включая зависимости от углов и поляризаций, которые в подходе Ферми получать трудно. Более того, развитый метод легко позволяет рассмотреть излучение высших мультиполей.

Рассмотрим теперь изучаемый переход более строгим образом. В терминах квантованного электромагнитного поля (разд. 12.3.3) для системы *атом + электромагнитное поле* это — переход из начального состояния $|\psi_u, n_{\mathbf{k}\lambda}, \dots\rangle$ в конечное состояние $|\psi_d, n_{\mathbf{k}\lambda} + 1, \dots\rangle$. Многоточие отмечает числа фотонов с другими \mathbf{k} и ε_λ , которые не меняются в рассматриваемом процессе.

В рассматриваемых задачах размер a области движения в состоянии, определенном невозмущенным гамильтонианом, достаточно мал ($ka \ll 1$), и в соответствии с (10.10) можно учитывать воздействие поля с излучающей системой как возмущение, линейное по оператору поля (12.24):

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc} \left(\frac{\hat{\mathbf{A}}(r)\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{A}}(r)}{2} \right) - g\mu_B(\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{B}}) \equiv -\frac{e}{mc}\hat{\mathbf{A}}(r)\hat{\mathbf{p}} - g\mu_B(\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{B}}). \quad (16.7)$$

Два выражения для этого оператора эквивалентны в силу (12.27). Мы употребляем обычно вторую из этих форм, но иногда удобнее использовать первую.

Амплитуда вероятности интересующего нас перехода принимает вид

$$V_{du} = \langle \psi_d, n_{\mathbf{k}\lambda} + 1, \dots | \hat{V} | \psi_u, n_{\mathbf{k}\lambda}, \dots \rangle \quad (16.8)$$

Главное (дипольное) приближение. Поскольку $ka \ll 1$, в экспонентах $e^{\pm ikr}$ для оператора поля (12.24) можно ограничиться только первым членом разложения по kr , т. е. положить $e^{\pm ikr} = 1$. В том же приближении отбрасывается и взаимодействие со спином. В итоге в нашем приближении

$$\hat{V} = \hat{V}^{(1)} = -\frac{e}{mc}\hat{\mathbf{A}}(0)\hat{\mathbf{p}}. \quad (16.9)$$

Теперь интересующий нас матричный элемент сводится к произведению матричного элемента между фотонными состояниями и матричного элемента импульса по невозмущенному гамильтониану. Полезно преобразовать последний, заметив, что $\hat{\mathbf{p}} = m\hat{\mathbf{r}}'$. По общим правилам $\langle \psi_f | \hat{\mathbf{p}} | \psi_i \rangle = m(i/\hbar) \langle \psi_f | \hat{H}\hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}}\hat{H} | \psi_i \rangle$. Вспоминая, что $\hat{H}|\psi_u\rangle = E_u|\psi_u\rangle$, $\hat{H}|\psi_d\rangle = E_d|\psi_d\rangle$, получим $(i/\hbar)\langle \psi_d | \hat{\mathbf{p}} | \psi_u \rangle = -im\omega_{ud}\mathbf{r}_{du}$. С учетом (12.25) это отвечает записи оператора взаимодействия в виде

$$\hat{V} = -\hat{\mathbf{d}}\hat{\mathcal{E}}(0), \quad \hat{\mathbf{d}} = e\hat{\mathbf{r}}. \quad (16.10)$$

Здесь $\hat{\mathbf{d}}$ — оператор дипольного момента атома, для многоэлектронной системы, очевидно, $\hat{\mathbf{d}} = \sum_a e_a \hat{\mathbf{r}}_a$.

Подставляя теперь в (16.8) выражения (12.25), (12.29), найдем

$$V_{du} = -\frac{i\omega_{du}}{c} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega L^3}} \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1} \cdot \varepsilon_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{d}_{du}. \quad (16.11)$$

Используя (14.27) и (14.25в), найдем теперь вероятность излучения фотона в единицу времени в элемент телесного угла¹ $d\Omega$

$$\begin{aligned} dr_{\mathbf{k}\lambda} &= \frac{2\pi}{\hbar} |V_{du}|^2 \delta(\hbar\omega - E_u + E_d) \frac{L^3 d^3 k}{(2\pi)^3} = \frac{L^3 \omega^2}{(2\pi\hbar)^2 c^3} |V_{du}|^2 \Rightarrow \\ &\Rightarrow dr_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{\omega_{du}^3}{2\pi\hbar c^3} |\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{d}_{du}|^2 (n_{\mathbf{k}\lambda} + 1) d\Omega. \end{aligned} \quad (16.12)$$

Объем L^3 из результата выпал, и, стало быть, ответ применим и для случая неограниченного пространства.

В этой формуле слагаемое, пропорциональное $n_{\mathbf{k}\lambda}$ описывает вынужденное излучение, при $n_{\mathbf{k}\lambda} = 0$ мы имеем дело со спонтанным излучением. В соответствии с (16.4) вынужденное поглощение света описывается точно такой же формулой с заменой $n_{\mathbf{k}\lambda} + 1 \rightarrow n_{\mathbf{k}\lambda}$.

Угловое распределение, поляризация, интенсивность. При описании вынужденного излучения направления векторов \mathbf{k} и ε_λ задаются источником поля, излученный свет *когерентно* складывается с падающим. В этом случае формула (16.12) определяет характер возбуждения дипольного момента и интенсивность излученного света. Ниже \mathbf{n} — единичный вектор, направленный вдоль волнового вектора, θ — полярный угол вылета фотона.

При описании спонтанного излучения формула (16.12) по известному типу возбуждения дипольного момента определяет угловое распределение, поляризацию и интенсивность излучения. Суммирование по поляризациям вылетевшего фотона с учетом (12.22) дает угловое распределение вероятности вылета фотона

$$\frac{dr_{\mathbf{k}}}{d\Omega} = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |[\mathbf{d}_{ud} \times \mathbf{n}]|^2, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}}{k}. \quad (16.13)$$

Излученный свет оказывается нетривиально поляризованным, если специальным образом поляризовать излучающую среду, организовав дело так, чтобы только некоторые компоненты матричного элемента \mathbf{d}_{ud} отличались от нуля. При этом различным оказывается и усредненное по поляризациям угловое распределение излучения. Приведем примеры.

∇ Если начальное u и (или) конечное d состояния организованы так, что $\mathbf{d}_{ud} \propto (0, 0, 1)$, то $dr_{\mathbf{k}}/d\Omega \propto \sin^2 \theta$ — как в классической задаче об излучении частицы, которая колеблется вдоль оси z .

∇ Если начальное и (или) конечное состояния организованы так, что $\mathbf{d}_{ud} \propto (1, \pm i, 0)$, то $dr_{\mathbf{k}}/d\Omega \propto (1 + \cos^2 \theta)$ — как в классической задаче об излучении частицы, которая вращается по окружности в плоскости (xy) .

Полная вероятность излучения в единицу времени (скорость излучения) получается из предыдущего выражения интегрированием по углам, а интенсивность излучения (энергия, излучаемая в единицу времени) I получается домножением скорости

¹Отметим, что в подходе предыдущего раздела такое дифференциальное распределение получить не удастся.

излучения на энергию одного фотона $\hbar\omega$:

$$r^{\text{спонт}} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{ud}|^2, \quad I = r^{\text{спонт}} \hbar\omega = \frac{4\omega^4}{3c^3} |\mathbf{d}_{ud}|^2. \quad (16.14)$$

Эти выражения, естественно, совпадают с полученными в подходе Ферми (16.6).

◇ Результат (16.6), (16.14) очень похож на результат классической электродинамики $I(\omega) = 2\omega^4/(3c^3)\langle|\mathbf{d}_\omega|^2\rangle$, но — на первый взгляд — отличается от него коэффициентом. В действительности эти результаты совпадают, просто в эти ответы входят разные объекты.

В квантово-механическое выражение (16.6) входит матричный элемент дипольного момента, отвечающий переходам *в одну сторону* $u \rightarrow d$. В классическое выражение входит Фурье-компонента дипольного момента с частотой ω_{ud} , отвечающая колебаниям $u \leftrightarrow d$. Эта Фурье-компонента состоит из двух слагаемых, отвечающих переходам $d \rightarrow u$ и $u \rightarrow d$, т. е.

$$\mathbf{d}_\omega = \mathbf{d}_{ud} e^{i\omega_{ud}t} + \mathbf{d}_{du} e^{-i\omega_{ud}t},$$

причем $\mathbf{d}_{du} = \mathbf{d}_{ud}^*$. Поэтому после возведения в квадрат и усреднения по времени получается $\langle|\mathbf{d}(t)|^2\rangle = 2\langle|\mathbf{d}_{ud}|^2\rangle$. При такой замене результат (16.6) по форме совпадает с классическим — в полном согласии с принципом соответствия.

§ 16.2. Излучение высших мультиполей

В ряде важных случаев представляют интерес излучение при переходах, для которых правила отбора (16.20) не выполняются. Иногда это — уникальный способ получить излучение той или иной необходимой нам частоты или получить сведения о деталях спектра состояний, иногда же структура уровней системы такова, что правила отбора (16.20) не выполняются ни для каких уровней, лежащих ниже интересующего нас уровня u . Переходы с нарушением правил отбора (16.20) называются *запрещенными*, поскольку их вероятности значительно меньше, чем для электрического дипольного излучения.

Второй порядок по ka . Итак, пусть $\mathbf{d}_{ud} = 0$. В этом случае в амплитуде перехода (16.8) необходимо учесть уже второй член разложения по \mathbf{kr} в показателях экспонент $e^{i\mathbf{kr}}$, входящих в разложение оператора поля по операторам рождения и уничтожения фотонов (12.24)¹. Тот же порядок по ka имеет и оператор спинового взаимодействия. В итоге взамен (16.10) оператор взаимодействия принимает вид:

$$\hat{V}^{(2)} = -\frac{ie}{mc} (\mathbf{kr})(\hat{\mathbf{A}}(0)\hat{\mathbf{p}}) - g\mu_B(\hat{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{B}}). \quad (16.15a)$$

Дальнейшее вычисление очень похоже на то, что делается в курсе электродинамики. В слагаемом, не содержащем спина, удобно перейти к покомпонентной записи скалярных произведений и разбить возникший тензор $r_i p_j$ на антисимметричную и

¹В приводимых формулах учитываются только слагаемые, отвечающие операторам рождения фотонов. Учет слагаемых с операторами уничтожения, необходимый при изучении поглощения света, не вносит ничего нового в результаты, сделал бы вычисления более громоздкими.

симметричную части:

$$\hat{V}_{s=0}^{(2)} = -\frac{ie}{mc} k_i r_i \hat{A}_j(0) \hat{p}_j \equiv -\frac{iek_i \hat{A}_j(0)}{2mc} [(r_i p_j - r_j p_i) + (r_i p_j + r_j p_i)] \equiv \hat{V}_a^{(2)} + \hat{V}_s^{(2)}. \quad (16.15б)$$

Антисимметричное слагаемое содержит компоненту вектора момента импульса $(r_i p_j - r_j p_i) = e_{ijk} \hat{L}_k \equiv e_{ijk} \hbar \hat{\ell}_k$. В итоге это слагаемое преобразуется к виду (ср. (10.9))

$$\hat{V}_a = -\frac{ie\hbar}{2mc} (\hat{\ell}[\mathbf{k} \hat{\mathbf{A}}(0)]) \equiv -\mu_B (\hat{\ell} \hat{\mathbf{B}}(0)).$$

Вторая форма здесь получена с помощью (12.25). Окончательно, добавляя еще слагаемое, содержащее спин, мы получаем, оператор, содержащий магнитный момент системы,

$$\hat{V}_a^{(2)} = -\hat{\mathbf{m}} \hat{\mathbf{B}}(0), \quad \hat{\mathbf{m}} = \mu_B (\hat{\ell} + g\hat{\mathbf{s}}). \quad (16.16)$$

Он определяет *магнитно-дипольное излучение*.

Для симметричной части \hat{V}_s мы пользуемся тем же преобразованием, что и при описании электрического дипольного излучения, с использованием первой формы в выражении для возмущения (16.7):

$$\begin{aligned} & \frac{e}{2} \langle \psi_d | (r_i \hat{p}_j + r_j \hat{p}_i + \hat{p}_j r_i + \hat{p}_i r_j) | \psi_u \rangle = \\ & = \frac{ime}{2\hbar} \langle \psi_d | (r_i \hat{H} r_j - r_i r_j \hat{H} + r_j \hat{H} r_i - r_j r_i \hat{H} + \hat{H} r_j r_i - r_j \hat{H} r_i + \hat{H} r_i r_j - r_i \hat{H} r_j) | \psi_u \rangle \equiv \\ & \equiv \frac{ime}{2\hbar} \langle \psi_d | (-r_i r_j \hat{H} - r_j r_i \hat{H} + \hat{H} r_j r_i + \hat{H} r_i r_j) | \psi_u \rangle = -\frac{ime}{\hbar} (E_u - E_d) \langle \psi_d | r_i r_j | \psi_u \rangle = \\ & = -ime \omega_{ud} \langle \psi_d | r_i r_j | \psi_u \rangle \equiv -\frac{im}{3} \omega_{ud} \langle \psi_d | Q_{ij} | \psi_u \rangle + G \delta_{ij}, \\ & \text{где} \quad Q_{ij} = e(3r_i r_j - r^2 \delta_{ij}), \quad G = -\frac{ime}{3} \omega_{ud} \langle \psi_d | r^2 | \psi_u \rangle. \end{aligned}$$

Здесь Q_{ij} — квадрупольный момент системы.

Подставляя получившееся выражение в симметричную часть оператора взаимодействия (16.15) с учетом (12.25), можно записать это взаимодействие в виде¹

$$\hat{V}_s^{(2)} = -\frac{Q_{ij}}{6} \frac{\partial \hat{\mathcal{E}}_i}{\partial r_j}(0). \quad (16.17)$$

Это выражение определяет *электрическое квадрупольное излучение*.

Вычисляя, наконец, матричные элементы (16.8) этих двух слагаемых по состояниям частица + поле с учетом (12.25), (12.29), найдем

$$V_{du,a}^{(2)} = -\frac{i\omega_{du}}{c} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega L^3}} \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1} \cdot \varepsilon_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{m}_{du}, \quad (16.18а)$$

$$V_{du,s}^{(2)} = -\frac{i\omega_{du}}{6c} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega L^3}} \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1} \cdot \varepsilon_{\mathbf{k}\lambda; i} k_j Q_{ij,du}, \quad (16.18б)$$

¹Слагаемое G из ответа выпало, т. к. коэффициент при нем есть $\delta_{ij} k_i A_j \propto (\mathbf{k}\varepsilon) = 0$.

При $n_{\kappa\lambda} = 0$ эти формулы описывают соответственно магнитное дипольное и электрическое квадрупольное излучение. Соответствующие скорости переходов, угловые распределения и интенсивности вычисляются точно так же, как и при выводе формулы для дипольного излучения (16.12). Из окончательного ответа объем L^3 выпадает. Получающийся результат совпадает с результатом классической электродинамики (с учетом видоизменения, обсуждавшегося в конце разд. 16.1.3).

По построению ясно, что

- а) четности состояний u и d должны совпадать (произведение $r_i \hat{p}_j$ не меняет знак при отражении);
- б) соответствующие скорости переходов в $(ka)^2 \lesssim \alpha^2$ раз меньше скоростей электрических дипольных переходов (если те возможны). Поэтому такие переходы называют *(однократно) запрещенными*.

Иногда оказывается, что обращаются в ноль и матричные элементы, входящие в (16.18). В этом случае приходится учитывать следующие члены разложения экспоненты $e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r})}$ по $(\mathbf{k}\mathbf{r})$. Принято говорить, что J -му члену разложения экспоненты $e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r})}$ по $(\mathbf{k}\mathbf{r})$ отвечает магнитный мультипольный переход (MJ) и электрический мультипольный переход ($EJ + 1$).

В частности, при $J = 0$ мы имеем электрический дипольный переход ($E1$), при $J = 1$ — магнитный дипольный переход ($M1$) и электрический квадрупольный переход ($E2$). В следующем за рассмотренным порядке по $(\mathbf{k}\mathbf{r})$ ($J = 2$) в покомпонентной записи возникает тензор $r_i r_k \hat{p}_j$. Как и выше, его удобно разбить на симметричную и антисимметричную части. Антисимметричная часть отвечает за магнитно квадрупольное излучение $M2$, а симметричная часть за электрическое октупольное излучение $E3$ (*дважды запрещенные переходы*).

По построению ясно, что в отсутствие запретов для спонтанного излучения

$$r_{ud}^{EJ} \sim r_{ud}^{E1} (ka)^{2(J-1)} \lesssim r_{ud}^{E1} \alpha^{2(J-1)}, \quad r_{ud}^{MJ} \sim r_{ud}^{E1} (ka)^{2J} \lesssim r_{ud}^{E1} \alpha^{2J}. \quad (16.19)$$

Иными словами, переходы высокой мультипольности очень маловероятны, это — двукратно, трехкратно и т. д. запрещенные переходы. Как и в классической электродинамике, скорости переходов (MJ) и ($EJ + 1$) — одного порядка.

§ 16.3. Правила отбора для излучения

В (16.6), (16.12) (16.14) входит матричный элемент электрического дипольного момента между состояниями u и d в атомной системе. Для заданного начального состояния u конечное состояние d , достижимое с помощью электрического дипольного перехода, не может быть произвольным. Набор возможных конечных состояний для данного начального и соответствующий набор не исчезающих матричных элементов при таких переходах даются правилами отбора для векторных операторов (разд. 11.2.1), которые для электрических дипольных $E1$ переходов читаются как хорошо известные условия отбора: моменты состояний u и d отличаются не более, чем на 1, а их четности противоположны. Схожая аргументация относится и к излучению высших мультиполей.

Пусть полные моменты состояний $|u\rangle$ и $|d\rangle$ равны соответственно j_u и j_d , а их четности это — P_u и P_d . Тогда (с учетом правил сложения моментов и сохранения

четности) должны выполняться *правила отбора*

$$\begin{array}{ll} \text{для (EJ) излучения} & \text{для (MJ) излучения} \\ |j_d - j_u| \leq J, \quad P_u \cdot P_d = (-1)^J, & |j_d - j_u| \leq J, \quad P_u \cdot P_d = (-1)^{J+1}. \end{array} \quad (16.20)$$

Полезно отметить, что для $J \geq 3$ эти правила отбора должны читаться как $|j_d - j_u| = J$. Действительно, при меньших $|j_d - j_u|$ допустимо излучение со значительно более вероятными переходами меньшей мультипольности.

Эти правила отбора можно понимать также как следствие того, что фотон — это частица со спином 1, при электрическом дипольном переходе он уносит наименьший возможный момент импульса, равный 1.

∇ Отметим, что переходы $j_u = 0 \rightarrow j_d = 0$ с излучением одного фотона запрещены. Они могут реализовываться лишь с излучением пары фотонов (второй порядок по взаимодействию), и соответственно значительно менее вероятны.

§ 16.4. Ширина спектральной линии

16.4.1. Собственная ширина уровня

Рассматривая атомные системы до сих пор, мы учитывали только (кулоновские по происхождению) взаимодействия электронов и ядер друг с другом. Это привело нас к концепции стационарных уровней энергии этих систем. Учет запаздывания фактически вводит дополнительное взаимодействие с электромагнитным полем вне ядер и электронов. Это взаимодействие ничтожным образом смещает уровни энергии. Более важно, что при этом уровни перестают быть в точности стационарными, в этом приближении необходимо учитывать обсуждавшуюся выше возможность спонтанного перехода с верхнего уровня u на один из нижних d с одновременным излучением фотона частоты ω_{ud} . Скорость этих переходов при электрическом дипольном излучении описывается соотношением (16.6), (16.14). Эта скорость определяет *парциальную собственную ширину спектральной линии* $\Gamma_{ud} = \hbar r_{ud}$.

Собственная ширина уровня Γ определяется полной скоростью уходов с уровня u , которая дается суммированием по всем нижележащим уровням d (т. е. это — сумма парциальных ширин). Она связана с временем жизни τ_c соотношениями (ср. (2.28)):

$$r_c = \sum_d r_{ud}, \quad \tau_c = \frac{1}{r_c}, \quad \Gamma = \sum_d \Gamma_{ud} = \frac{\hbar}{\tau_c} \equiv \hbar \cdot r_c. \quad (16.21)$$

◇ Используя (16.6), получим сначала грубую оценку ширины уровня, обусловленной ($E1$) переходом (ниже мы опускаем значок ud у частоты):

$$\Gamma_{ud} \sim \hbar \omega \frac{e^2 \omega^2}{\hbar c^3} \langle |\mathbf{r}|^2 \rangle \sim \hbar \omega \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \left(\frac{\omega a}{c} \right)^2 \sim \hbar \omega \alpha (ka)^2. \quad (16.22)$$

Здесь среднее значение матричного элемента \mathbf{r}^2 оценивается как квадрат характерного атомного размера a и $k = \omega/c$. Для атома водорода обычно $ka \sim \alpha$, поэтому $(\Gamma/\hbar\omega) \sim \alpha^3$.

Вычислим это отношение более аккуратно для перехода $2p \rightarrow 1s$ в атоме водорода. В этом случае $\hbar\omega_{ud}(3/4)R_y$, а матричный элемент $\langle 2p|\mathbf{r}|1s\rangle$ вычисляется с помощью (7.22в). Выберем для определенности $|2p\rangle = |2, 1, 0\rangle$. Тогда

$$r_{21} = \langle 2, 1, 0|z|1, 0, 0\rangle = \int \left(\frac{ire^{-r/2a_B} \cos\theta}{\sqrt{32\pi a_B^5}} \right) r \cos\theta \left(\frac{e^{-r/a_B}}{\sqrt{\pi a_B^3}} \right) r^2 dr d\Omega = ia_B \frac{2^{15/2}}{3^5}.$$

(Матричные элементы $\langle 2, 1, 0|x|1, 0, 0\rangle = \langle 2, 1, 0|y|1, 0, 0\rangle = 0$.)

Вспомогая теперь, что в силу теоремы вириала для атома водорода $1R_y = e^2/2a_B$ и собирая все коэффициенты из (16.6), найдем

$$\Gamma = \left(\frac{4}{3} \frac{2^{15}}{3^{10}} \right) \alpha \frac{[(3/4)(R_y/\hbar)]^2 a_B^2}{c^2} \hbar\omega = \frac{2^{11}}{3^9} \alpha^3 \approx 0,1 \alpha^3 \hbar\omega.$$

Выполним подобную оценку для состояния $|n+1, \ell = n, m\rangle$ атома водорода при $n \gg 1$ (*Ридберговский атом*). Согласно правилам отбора, возможен только переход $|n+1, \ell = n, m\rangle \rightarrow |n, \ell = n-1, m\rangle$. Энергии рассматриваемых состояний $E_u = -R_y/(n+1)^2$ и $E_d = -R_y/n^2$, т. е. $\omega_{ud} \approx 2R_y/\hbar n^3$. Матричный элемент z_{ud} близок к радиусу соответствующей орбиты $a_B n^2$. Тогда оценка (16.22) приобретает вид

$$\Gamma \sim \alpha \frac{[R_y/(\hbar n^3)]^2 (a_B n^2)^2}{c^2} \hbar\omega \sim (\alpha^3/n^2) \hbar\omega \sim (\alpha^3/n^5) R_y, \quad (16.23)$$

с ростом n ширина рассматриваемого уровня становится все меньше.

Время жизни состояния уменьшается, а его собственная ширина увеличивается для состояний $|n+1, \ell, m\rangle$ с $\ell < n$, поскольку для них становятся возможными переходы на множество ниже лежащие уровни со значительно большими частотами переходов (см. задачу 13.2).

Оценим, в частности, собственную ширину состояния $|i\rangle \equiv |n, 1, 0\rangle$ при $n \gg 1$. Основной вклад в эту ширину дает переход в основное состояние $|f\rangle \equiv |1, 0, 0\rangle$ с частотой перехода $\omega = R_y(1 - 1/n^2)/\hbar \approx R_y/\hbar$. В этом случае матричный элемент перехода

$$d_{fi} = e \left(\int R_{n,1} r R_{1,0} r^2 dr \right) \cdot \left(\int Y_{10}^* \cos\theta Y_{00} d\Omega \right) \equiv e r_{fi} c_{fi}.$$

Угловой интеграл c_{fi} легко вычисляется с помощью (6.24). Для вычисления радиального интеграла r_{fi} заметим, что при условии $n \gg 1$ множитель $R_{1,0}$ обеспечивает быстрое падение подынтегрального выражения при $r > 1$. Поэтому в рассматриваемом интеграле можно использовать взамен функции $R_{n,1}$ ее асимптотическое представление (7.18), после чего легко получается $r_{fi} = 8a_B n^{-5/2}$. В итоге (напомним, что $R_y a_B = e^2/2$ и $e^2/(\hbar c) = \alpha$)

$$\Gamma = \frac{4e^2\omega^3}{c^3} |c_{fi}|^2 |r_{fi}|^2 = \frac{4 \cdot 64e^2 R_y^3 a_B^2}{3\hbar^3 c^3 n^5} = \alpha^3 R_y \frac{64}{3n^5}. \quad (16.24)$$

Эта парциальная ширина — того же порядка, что и ширина, связанная с переходом на близко лежащий уровень (16.23). Полная ширина уровня складывается из $n - 1$ парциальных ширин излучения с переходами на все нижележащие уровни, каждая из которых имеет примерно одинаковую величину.

16.4.2. Ширина наблюдаемой спектральной линии

• **Из чего складывается наблюдаемая ширина линии.** Оценка разд. 16.4.1 аккуратно описывает собственную ширину уровня $\Gamma_{\text{собств}}$ только в разреженном газе, где влияние других атомов на излучение данного атома пренебрежимо мало. При повышении плотности время жизни возбужденного состояния уменьшается из-за соударений (*ударное уширение*), в конденсированных средах — из-за взаимодействий с соседями.

Видимое уширение спектральной линии Γ_{vis} обычно значительно больше того, что дают рассмотренные эффекты, в частности, потому, что оно включает разброс частот, обусловленный тепловым движением атомов (из-за эффекта Доплера). Характерная величина этого уширения $\Gamma_{\text{term}}/(\hbar\omega) \sim v/c$, где v — характерная тепловая скорость молекул, близкая к скорости звука в среде, $\Gamma_{\text{term}}/(\hbar\omega) \sim \sqrt{kT/(Mc^2)}$, где T — температура, а M — масса молекулы, (13.1). Для излучения видимого света при комнатной температуре последнее отношение составляет примерно 10^{-6} , т. е. тепловое уширение линии больше уширения линии каждого излученного кванта, определяемого собственной шириной. Поэтому прямое измерение собственной ширины линии обычно — трудная задача.

• **Что излучается.** Состояние, из которого происходит излучение, имеет конечную ширину. В одном переходе излучается один фотон (*однофотонный волновой пакет*), направление вылета которого определяется случайным образом в соответствии с распределением, например (16.6). Подчеркнем, что *этот фотон — не вполне монохроматический*, его распределение по энергиям определяется собственной шириной уровня, а распределение по направлениям вылета (вблизи направления излучателя — приемник) — размерами излучателя (атома) и импульсом отдачи.

Таким образом свет, идущий в заданном направлении от какого-нибудь природного источника представляет собой набор параллельных однофотонных волновых пакетов длиной $L_1 \approx \hbar c/\Gamma_{\text{собств}}$ со случайно распределенными «началами». Двигаясь вдоль луча, мы наблюдаем в некоторой точке какие-то фазовые соотношения между полями разных пакетов. При дальнейшем движении вдоль луча эти соотношения медленно меняются. На расстояниях $L_{\text{corr}} \sim \hbar c/\Gamma_{\text{vis}}$ эти соотношения уже ничем не напоминают того, что было в начальной точке. Именно эта длина имеет смысл длины корреляции луча, или — что то же — длины когерентности.

16.4.3. Об интерференции волн. Когерентность

Чтобы проиллюстрировать смысл этого понятия — длины когерентности, рассмотрим простейшую схему (Юнга) по наблюдению интерференции в оптике. Плоская волна от монохроматиче-

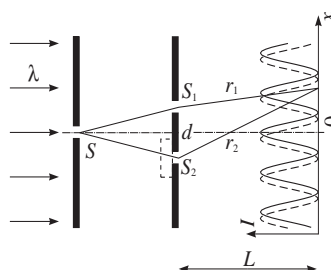


Рис. 16.1. Схема Юнга интерференции волн

ского источника проходит через щель S , имитирующую точечный источник, далее свет проходит через пару щелей S_1 и S_2 , расположенных на расстоянии $d \ll L$ друг от друга. Сигнал регистрируется на экране, расположенном на расстоянии L от пары щелей. Фазы волн, пришедших через разные щели в точку экрана с координатой x по отношению к проекции середины расстояния между щелями O , различаются на величину kxd/L , где k — волновой вектор. Это приводит к интерференционной картине с максимумами, расположенными на расстоянии $\lambda L/d$ друг от друга.

Принято считать, что такая схема обеспечивает одинаковость частот двух интерферирующих лучей. Однако, в большинстве случаев (кроме лазеров), как уже говорилось, источник испускает сильно не монохроматический свет (например, из-за теплового уширения). Как же обеспечивается возможность наблюдения интерференционной картины?

Рассмотрим для простоты газовый источник света (чтобы можно было пренебречь влиянием соседних излучателей друг на друга). Как уже говорилось выше, один возбужденный атом испускает один фотон. Волна вероятности, соответствующая этому фотону, проходит через обе щели S_1 и S_2 и далее регистрируется (фиксируется) в какой-нибудь точке экрана. В приближении строгой монохроматичности источника вероятность этой регистрации определяется обычными интерференционными расчетами, в частности максимумы вероятности расположены на расстоянии $\lambda L/d$ друг от друга до тех пор, пока разность длин хода лучей не достигает величины L_1 . Соседний атом излучает свет совсем другой длины волны λ_1 (в силу эффекта Доплера), он порождает распределение вероятностей с максимумами на расстоянии $\lambda_1 L/d$ друг от друга. Поскольку отличие λ_1 от λ не слишком велико ($(|\lambda_1 - \lambda|/\lambda \sim \Gamma_{vis}/\hbar\omega \sim 10^{-6})$), максимумы невысокого порядка, доставляемые разными фотонами, лежат вблизи друг от друга, и суммарный эффект демонстрирует нам классическую интерференционную картину. Для разностей хода $\rho \approx L_{corr} \approx \hbar c/\Gamma_{vis}$ максимумы и минимумы, отвечающие разным источникам, перекрываются, именно величина L_{corr} играет роль продольной длины когерентности (см. подробнее в [18]).

§ 16.5. Принципы работы лазеров

Рассмотрим тело, чьи атомы (или молекулы) имеют возбужденные состояния u с запрещенным переходом в основное состояние d и с кратностями вырождения этих состояний g_u и g_d . Обозначим через $N(u)$ и $N(d)$ числа атомов в этих состояниях (*заселенности*) и через $E_{ud} = \hbar\omega_{ud}$ энергию возбуждения (разность энергий уровней). В термодинамическом равновесии заселенность верхнего уровня меньше, чем нижнего, согласно распределению Больцмана,

$$N(u)/N(d) = (g_u/g_d)e^{-E_{ud}/kT}.$$

Пусть найден способ создать *инверсную заселенность* $N(u) > N(d)$ (один из способов ее создания мы обсудим далее). Поскольку переход $u \rightarrow d$ запрещен,

система может довольно долго оставаться в этом состоянии (*состояние с отрицательной температурой*).

Направим по этому телу луч света (пучок фотонов) с частотой ω_{ud} . Под действием поля этих фотонов к очень маловероятному (запрещенному) спонтанному излучению добавится вынужденное излучение, которое усиливается (пропорционально n) по мере прохождения вещества, поскольку к первоначальным фотонам пучка будут добавляться все новые излученные фотоны. Если это тело представляет собой сплошной цилиндр, ограниченный параллельными зеркалами, то при обратном прохождении света сигнал еще усилится и т. д., до тех пор, пока инверсная заселенность не ликвидируется. Такую систему и называют лазером (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation). Как и другие подобные системы, лазер может работать и в режиме усилителя (с внешним возбуждением), и в режиме генератора (когда он возбуждается фотонами от спонтанного перехода).

По механизму рождения ясно, что получившееся излучение когерентно и имеет очень малую угловую расходимость (фотоны, летящие под углом, вылетают наружу и не воспроизводятся; фотоны рождаются когерентно с «родителями»). Это излучение обычно поляризовано.

Один из распространенных способов создания инверсной заселенности — оптическая накачка. Она возможна, если в наших атомах в дополнение к паре уровней d и u существует еще вышележащий уровень h ($E_h > E_u > E_d$), причем переходы $h \rightarrow u$, $h \rightarrow d$ — разрешенные. Для накачки система освещается интенсивным источником монохроматического света, среди характерных частот которого есть и ω_{hd} . Забудем на минуту о существовании уровня u . Тогда под воздействием накачки средние заселенности уровней h и d практически сравняются (чтобы обеспечить равенство числа переходов сверху вниз и снизу вверх; спонтанными переходами можно пренебречь по сравнению с вынужденными). Наличие уровня u меняет дело. После возбуждения уровня h последний быстро излучает — либо в состояние d , либо в состояние u . Но с состоянием d происходит непрерывный обмен, а состояние u оказывается «могилой», в которой атомы остаются долго, поскольку излучение из этого состояния запрещено. Со временем в это состояние переходит все больше атомов, а заселенности состояний d и h становятся все меньше — создается необходимая инверсная заселенность.

§ 16.6. Задачи

1. Найти собственную (радиационную) ширину 1-го возбужденного уровня заряженного трехмерного осциллятора

$$\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m) + m\omega^2\mathbf{x}^2/2.$$

2. Найти собственную (радиационную) ширину состояний атома водорода $|2, 1, 0\rangle$, $|3, 1, 0\rangle$ и $|n\ell = n - 1, m\rangle$. Сравнить ее с доплеровской шириной при комнатной температуре.

Ответ для $n = 2$:
$$\frac{\Gamma}{\hbar\omega_{2,1}} = \frac{2^{11}}{3^9}\alpha^3 \approx 3 \cdot 10^{-8}.$$

3. Используя выражения для собственных функций атома водорода (6.24), найти собственную (радиационную) ширину всех состояний атома водорода с $n = 3$.

Приложение 17

ПОЛЕЗНЫЕ ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ СВЕДЕНИЯ

§ 17.1. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА НА КОМПЬЮТЕРЕ

Это приложение написано по материалам, предоставленным Г. Л. Коткиным.

17.1.1. Постановка задачи

В пакете программ QUANT (см. подробное описание в [12]) многие физические ситуации моделируются для одномерной системы последовательностью прямоугольных стенок и барьеров вида, изображенного на рис. А.1.

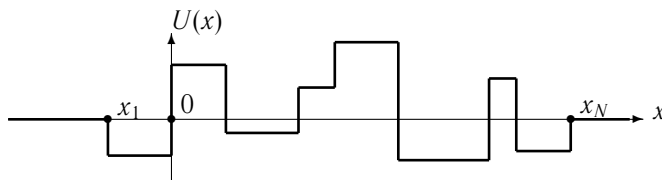


Рис. А.1.

Моделирование обобщает подход, использованный при решении задачи о прямоугольной яме 2.4.1, и осуществляется следующим образом.

При некоторой энергии E в каждой из небольших областей с $V(x) = \text{const} = V_i$ вычисляется одна из величин $k_i = \sqrt{2m(E - V_i)}/\hbar$ или $\kappa_i = \sqrt{2m(V_i - E)}/\hbar$ (та из них, которая действительна). В этой области решение имеет вид

$$C_{1i}e^{ik_ix} + C_{2i}e^{-ik_ix} \quad \text{или} \quad B_{1i}e^{-\kappa_ix} + B_{2i}e^{\kappa_ix}.$$

◇ В случае $E < 0$ в самой левой области (при $x < x_1$) выбирается решение в виде волны, спадающей налево (при $x \rightarrow -\infty$), $e^{\kappa x}$. Далее, с помощью условий сшивки (2.15) на первом скачке потенциала численно определяются коэффициенты $C_i(B_i)$ для второй области. Затем решения подводятся ко второму скачку, и опять с помощью условий сшивки (2.15) определяются коэффициенты $C(B)$ в третьей области. Так же находятся в конце концов коэффициенты $C(B)$ в крайней правой области ($x > x_N$).

При $x > x_N$ обсуждаемое решение имеет вид

$$\psi = D(E)e^{-\kappa x} + B(E)e^{\kappa x}. \quad (17.1)$$

Повторение вычислений при разных E позволяет построить график зависимости коэффициента B при растущей экспоненте от E . Собственные значения — уровни энергии — отвечают точкам, где $B = 0$ (т. е. в них выполняется граничное условие (2.18) — $\psi(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty$).

◇ В случае $E > 0$ решение строится почти так же. Процедура стартует с волны, уходящей при $x < x_1$ в левую сторону, e^{-ikx} . Затем проводятся последовательные сшивки, и в самой правой области, при $x > x_N$ решение имеет вид

$$\psi = C_2 e^{ikx} + C_1 e^{-ikx}. \quad (17.2)$$

Это решение нормируется на волну, падающую справа e^{ikx} . Для этого полученная волновая функция делится на C_2 . При этом коэффициент прохождения $T = |C_2|^{-2}$, коэффициент отражения $R = |C_1/C_2|^2$.

В практических вычислениях вводятся единица длины a и соответствующая единица энергии $\varepsilon_0 = \hbar^2/(2ma^2)$ (для электрона при атомном размере $a = 0,5 \cdot 10^{-8}$ см имеем $\varepsilon_0 = 13,6$ эВ, для протона в ядерном размере $a = 10^{-13}$ см (1 ферми) $\varepsilon_0 \approx 20$ МэВ). Далее рассматриваются безразмерные величины

$$\tilde{x} = x/a, \quad \tilde{E} = E/\varepsilon_0, \quad \tilde{U} = U/\varepsilon_0, \quad \tilde{\psi} = \psi/\sqrt{a}.$$

После этого уравнение Шредингера и условие нормировки в случае дискретного спектра принимают вид

$$-\frac{d^2 \tilde{\psi}(\tilde{x})}{d\tilde{x}^2} + \tilde{U}(\tilde{x})\tilde{\psi}(\tilde{x}) = \tilde{E}\tilde{\psi}(\tilde{x}), \quad \int |\tilde{\psi}(\tilde{x})|^2 d\tilde{x} = 1. \quad (17.3)$$

Далее в этом приложении значки тильда опускаются.

Параметры ям можно менять в очень широких пределах, но для некоторых их значений необходима повышенная точность вычислений. Если не делать специальных усилий, это может привести к неправильным выводам. Предлагаемые ниже значения параметров не приводят к таким неточностям.

• Авторы разработали большой набор вопросов, относящихся к рассеянию и т. п. Инициативный пользователь сумеет поставить и решить с помощью этих программ еще много вопросов. Во многих случаях для этого достаточно рассмотреть только другие наборы параметров. В пособии [8] приведено множество физических задач, которые удастся проанализировать с помощью обсуждаемого пакета программ уже на уровне студенческих упражнений.

17.1.2. Конечный набор ям

Задание 1 (2 занятия). Простая яма или барьер и пара ям

Цели первых упражнений —

- увидеть, как возникают уровни дискретного спектра (как появляются собственные значения) (упражнения 1,3);
- рассмотреть основные свойства спектра состояний простейшей системы — прямоугольной потенциальной ямы и рассеяния на ней (и рассеяния на аналогичном потенциальном барьере) при различных значениях ее параметров (упражнения 1-3);
- проверить, что основные явления лишь слабо зависят от формы ямы или барьера в достаточно широких пределах изменения этой формы (упражнения 1,7);
- изучить особенности мелкой или δ -видной ямы (упражнение 2);
- дополнительно: увидеть, какова связь между положениями уровней и пиками коэффициента прохождения (упражнения 4,5);
- рассмотреть расплывание пакета над областью потенциала (упражнение 8).

В соответствии с этим предлагается выполнить следующий набор упражнений.

1. Рассмотреть потенциальные ямы глубиной $U_a = -20$ и -10 , при ширине ямы $a = 1$ и 5 . Стартуя со значения энергии E , отвечающего дну ямы, рассмотреть поведение волновой функции справа от ямы при разных значениях E . Убедиться, что решение нормируемо лишь при некоторых значениях E . Рассмотреть зависимость коэффициента B при растущей направо экспоненте (17.1) от энергии. Найти уровни энергии, волновые функции, распределения по импульсам. Что именно определяет ширину и положение максимумов в распределении по импульсам?
Проследить за изменением положения уровней при увеличении ширины ямы. Сравнить с уровнями бесконечно глубокой ямы, смещенной на глубину U_a .
Для $a = 1$ проследить за изменением положения верхнего уровня энергии при изменении U_a от 10,5 до 9,5. Одновременно рассмотреть зависимость коэффициента прохождения от энергии при энергиях $E \leq 15$.
2. Сравнить узкую (δ -видную) яму $U_a = -20$, $a = 0,1$ и мелкую яму $U_a = -0,2$ при $a = 1$. Сравните разброс координат частицы с размером ямы. При каком a возникает второй уровень? Придумайте как найти силу, действующую на стенку ямы и определите ее.
3. Рассмотреть пару ям с $U_a = -20$, $a = 1$ и расстоянием $b = 0,5$ между ними. Рассмотреть зависимость коэффициента B при растущей направо экспоненте (17.1) от энергии (и при разных значениях a и b). Найти энергии связанных состояний и их волновые функции в этой паре ям. Сравните эти энергии и волновые функции с энергиями и волновыми функциями одиночной ямы. Рассмотреть эволюцию этих уровней с изменением b .
При переходе от одной ямы к паре аналогичных ям оказывается, что каждый из уровней одиночной ямы расщепляется на два. При некоторых значениях параметров верхний уровень одиночной ямы в парной яме не дуб-

лируется. Запомните этот набор параметров, обозначим его «набор H ».

4. Рассмотреть зависимость коэффициента прохождения $T(E)$ над ямой $U_a = -20$ и горбом $U_a = 20$ при $a = 5$ и при $a = 1$ от энергии от $E = 0$ до $E = 50$ (сначала до $E = 30$). Изучить изменение этой зависимости при изменении a . Объяснить сходство и различие.
Для случая $U_a = -20$, $a = 3$ просмотреть зависимость $|\psi_E(x)|^2$ от энергии E в интервале от $E = 0$ до $E = 30$, обратить внимание на то, что при $T(E) = 1$ амплитуды волновой функции вне и внутри ямы сравниваются, что резко противоречит классической картине.
5. Рассмотреть зависимость от энергии коэффициента прохождения $T(E)$ над парой ям с $U_a = -20$, $a = 3$ и расстоянием $b = 0,5$ между ними. Рассмотреть особенности этой зависимости для набора параметров H и близких к нему параметров.
6. Рассмотреть пару барьеров $U_a = 10$, $a = 0,5$ с расстоянием между ними $b = 1$, $U_b = 0$. В зависимости $T(E)$ первый пик связан с основным квазиуровнем, второй — с надбарьерным квазиуровнем. (Такая система аналогична эталону Фабри-Перо или нейтронному интерференционному фильтру.) Просмотреть зависимость $|\psi_E(x)|^2$ от энергии E в интервале от $E = 0$ до $E = 30$, обратить внимание на то, что при $T(E) = 1$ амплитуда волновой функции между барьерами велика. Сопоставить положение резонансов и уровней в яме с $U_a = -10$, $a = 1$.
7. Рассмотреть те же вопросы в случае, когда отдельной ямой или повторяющимся элементом пары ям является не простая яма, а более сложный объект, например, яма со ступенькой ($U = -15$ при $0 < x < 3$, $U = -5$ при $3 < x < 5$).
8. Сформировать волновой пакет из нескольких плоских волн справа от ямы. Рассмотреть его прохождение над простой ямой и горбом, над парой ям.

Задание 2. Набор ям, переход к решеткам

Цели упражнений —

- рассмотреть появление энергетических зон в кристалле с небольшим числом ячеек, т. е. при переходе от отдельной ямы или барьера к набору повторяющихся ям или барьеров (упражнения 1–3);
- рассмотреть эффекты примесей, неточного воспроизведения ям в кристаллах, влияние границ кристалла на уровни (упражнение 4).

В соответствии с этим предлагается выполнить следующий набор упражнений.

1. Рассмотреть уровни энергии и волновые функции для двух узких ям $U_a = -20$, $a = 0,1$, $U_b = 0$ при изменении расстояния между ямами b от 0 до 3. Рассмотреть ту же задачу для пары немного различающихся ям $U_1 = -22$, $U_2 = -20$, $a = 0,1$, $U_b = 0$ при том же изменении расстояния между ямами. Рассмотреть те же задачи для $a = 1$.
Рассмотреть зависимость от времени квадрата модуля волновой функции, первоначально сосредоточенной внутри одной из ям. Что можно сказать о периоде биений?
Сравнить положения уровней и волновые функции с их значениями для одной «усредненной» ямы.

2. Рассмотрите сначала одну уединенную яму, например, $U_a = -20$, $a = 3$, затем расположим на расстоянии $b = 1$ от нее еще одну такую же яму, две, три, и так до восьми. Если уровни первоначальной ямы обозначить через E_1, E_2, \dots, E_k , то в системе из n ям каждый из этих уровней превратится в группу из n уровней (для верхнего уровня число дочерних уровней может оказаться меньше — *выталкивание уровней*). Убедитесь, что с увеличением b число вытолкнутых уровней уменьшается. Как меняется при этом расстояние между уровнями в каждой группе?
3. Рассмотреть зависимость от энергии коэффициента прохождения над указанными выше системами. Рассмотреть ту же зависимость для системы барьеров $U_a = 20$, $a = 0, 1$ и $a = 3$ с расстояниями между барьерами $b = 1$. Убедиться в том, что при росте числа ям или барьеров появляются энергетические интервалы практически полной прозрачности и непрозрачности со все более резкими границами (прообразы разрешенных и запрещенных зон в кристалле). Рассмотреть волновые функции в этих интервалах. Рассмотрите те же задачи для случая, когда тиражируется яма более сложной формы, например, $U_a = -15$ при $0 < x < 1$, $U_a = -5$ при $1 < x < 3$ для расстоянии между ямами $b = 1$. Найдите какие-нибудь наборы параметров, отвечающие случаям с выталкиванием уровней. Покажите, что в этом случае существуют области прозрачности при низких энергиях.
4. Будут ли состояния частиц в поле, образованном парой ям, делокализованы, если ямы разные, но некоторые уровни в этих ямах, рассматриваемых поодиночке, совпадают?
5. Рассмотреть шесть ям $U_a = -20$, $a = 1$, $b = 0, 7$, $U_b = 0$, сделав третью яму чуть глубже $U_3 = -21$ или мельче $U_3 = -19$, обнаружить локализацию одного из состояний на этой примеси.

17.1.3. Задание 3. Периодическое поле

В случае периодического поля повторяющаяся ячейка строится из прямоугольных ям и барьеров. Для каждой энергии слева задается общее решение, например, $A \sin kx + B \cos kx$ (a не убывающее или уходящее направо, как делалось для конечной системы ям или горбов). Далее с помощью условий сшивки (2.15) на границах производится переход к следующей ячейке, и отыскиваются коэффициенты A' и B' такого же решения при $x > a$, $A' \sin k(x - a) + B' \cos k(x - a)$. Эти коэффициенты A' , B' выражаются через A , B также и с помощью условия инвариантности относительно конечного сдвига (8.1), $A' = e^{iqa} A$, $B' = e^{iqa} B$. Получающиеся соотношения составляют уравнение для определения квазиимпульса q при заданной энергии E (или зависимости E от q). Для значений энергии, принадлежащих запрещенной зоне, это уравнение не имеет действительного решения.

Цели упражнений — понять, как возникают энергетические зоны в периодическом поле, как выглядит зависимость энергии от квазиимпульса для разных зон.

В соответствии с этим предлагается выполнить следующий набор упражнений.

1. В одной яме $U_a = -20$, $a = 1$ имеется всего два уровня. В периодическом поле, построенном из таких ям с расстоянием $b = 0,5$, $U_b = 0$, появляются две зоны в области $E < 0$. Для просмотра удобно выбрать масштаб U в интервале от -22 до $+22$ и такой же интервал для энергии E . Просмотрите вид $Re\psi(x)$ и $Im\psi(x)$ для значений энергии, соответствующих дну нижней зоны, чуть выше и чуть ниже.
2. Просмотрите то же самое в трехмерном изображении, где на осях отложены x , $Re\psi(x)$ и $Im\psi(x)$. Просмотрите то же самое при непрерывном изменении энергии в интервале, включающем и запрещенную зону.
3. Зависимость энергии от квазиимпульса $E(q)$. В случае слабого периодического поля $U_a = -0,5$, $a = 1$, $b = 1$, $U_b = +0,5$ кривая $E(q)$ представляет собой куски параболы с малыми разрывами. Интересен вид квадрата модуля волновой функции вблизи разрывов — на границах разрешенных зон.
4. Локализация состояний в периодическом поле, составленном из двух разных по глубине ям $U_1 = -10$, $U_2 = 0$, $U_3 = -15$, $U_4 = 0$ при расстояниях $d_1 = 1$, $d_2 = 0,3$, $d_3 = 1$, $d_4 = 0,3$.
5. Просмотреть, как изменяется зависимость $E(q)$ при формальном удвоении периода. Затем сделать ямы в периоде не одинаковыми.

17.1.4. Задание 4. Движение в центральном поле

В программе QUANTS центрально-симметричный потенциал аппроксимируют последовательностью ступенек (по радиусу). В каждой из них решение имеет вид (7.10) с соответствующим $k = \sqrt{2m(E - U_i)/\hbar^2}$, действительным или мнимым. Правила шивки на каждой границе те же, что и для обычного одномерного движения. Программа может стартовать с начала координат, $r = 0$, где решение имеет форму $R^s(r)$. После последней границы должно получаться¹ либо экспоненциально убывающее решение (дискретный спектр), либо решение в форме (7.12) (непрерывный спектр). В первом случае условие исчезновения растущей экспоненты дает уровни энергии, во втором случае из решения получаются фазы рассеяния. Задача моделирования — понять особенности трехмерной задачи в сравнении с одномерной.

В соответствии с этим предлагается выполнить следующий набор упражнений.

1. Определить уровни энергии в прямоугольной (по радиусу) потенциальной яме.
2. Рассмотреть частицу в «слое»

$$U_1 = 0, U_2 = -20, U_3 = -15, d_1 = 1, d_2 = 0,3.$$
Изучить аналогию с вращательными уровнями молекулы.
3. Рассмотреть трехмерный гармонический осциллятор в приближении суммы ступенек. Определить четность и кратности вырождения уровней. Рассмотреть погрешность приближения ступеньками.
4. Рассмотреть кулоновскую задачу в приближении суммы ступенек. Определить четность и кратности вырождения уровней. Рассмотреть погрешность приближения ступеньками.

¹Прямое применение такой схемы может привести к серьезным вычислительным трудностям. Используется модификация указанной схемы, уменьшающая эти трудности.

§ 17.2. Математические дополнения

17.2.1. Некоторые тензоры

В тексте широко используются два тензора, вид которых не меняется при вращениях осей координат, симметричный тензор δ_{ij} и совершенный антисимметричный тензор e_{ijk} (иногда ε_{ijk}). Они определяются следующим образом:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j, \\ 0 & \text{при } i \neq j. \end{cases} \quad (17.4)$$

$$\begin{aligned} e_{ijk} &= -e_{jik} = -e_{ikj} = e_{kij} = \dots \\ e_{123} &= 1, \quad e_{122} = e_{311} = \dots = 0. \end{aligned} \quad (17.5)$$

Тензор δ_{ij} , элементы которого равны единице при совпадающих значениях индексов и нулю при несовпадающих, определен не только в трехмерном пространстве, но и в пространстве любой размерности.

Совершенный антисимметричный тензор e_{ijk} определен только в трехмерном пространстве. Он определяется так, что его элементы меняют знак при любой перестановке соседних индексов и $e_{123} = 1$. По этому определению, элементы с двумя (или тремя) совпадающими индексами равны нулю, а остальные элементы равны $+1$ или -1 в зависимости от четности перестановки индексов 1, 2, 3.

В дальнейших примерах мы считаем, что по повторяющимся индексам выполняется суммирование. Скалярное произведение двух векторов $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)$ и $\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3)$ можно записать в виде

$$(\mathbf{a}\mathbf{b}) = a_i b_i \equiv \delta_{ij} a_i b_j.$$

Тензор e_{ijk} используется для записи компонент векторного произведения и ротора. Так, для векторного произведения тех же двух векторов и для ротора вектора \mathbf{a} имеем

$$[\mathbf{a} \times \mathbf{b}]_i = e_{ijk} a_j b_k, \quad \text{rot } \mathbf{a}_i = e_{ijk} (\partial/\partial x_j) a_k.$$

17.2.2. δ -функция, θ -функция

• **Определение.** Как известно, δ -функция — не обычная функция, а *обобщенная функция*, или *распределение*. Эта функция обращается в ноль при $x \neq 0$, она не определена при $x = 0$. δ -функция задается на пространстве обычных гладких функций $g(x)$ правилом свертки с любой из функций $g(x)$,

$$\int_a^b g(x) \delta(x) = \begin{cases} g(0) & \text{при } a < 0 < b, \\ 0 & \text{при } a, b > 0 \text{ или } a, b < 0. \end{cases} \quad (17.6)$$

• **δ -функция — предел последовательностей обычных функций.** Во многих задачах δ -функция возникает как предел последовательности обычных функций,

например,

$$\begin{aligned}\delta_1(x) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2}, \quad \delta_2(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\pi} \varepsilon} e^{-x^2/\varepsilon^2}, \\ \delta_3(x) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \left(\frac{\sin^2 xt}{\pi x^2 t} \right).\end{aligned}\quad (17.7)$$

Все эти представления описывают одну и ту же δ -функцию, определенную равенством (17.6). Для функции $\delta_3(x)$, совпадающей с (14.26), это было показано в гл. 14. Для функции $\delta_1(x)$ это видно из цепочки равенств

$$\begin{aligned}\int g(x) \delta_1(x) dx &= \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \int_{-a}^b \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} g(x) dx \stackrel{x=y\varepsilon}{=} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \int_{-a/\varepsilon}^{b/\varepsilon} \frac{1}{y^2 + 1} g(y\varepsilon) dy = \\ &= g(0) \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{y^2 + 1} dy = g(0).\end{aligned}$$

Предельный переход $\delta_1(x)$ описывает, в частности, как от описания нестабильной частицы перейти к случаю, когда эффекты нестабильности не важны, и частицу можно считать стабильной.

• **δ -функция от сложного аргумента.**

Пусть $f(x) = 0$ при $x = x_0$. Тогда

$$\delta[f(x)] = \frac{1}{|f'(x_0)|} \delta(x - x_0). \quad (17.8)$$

Рассмотрим $I = \int \varphi(x) \delta[f(x)] dx$. Вблизи $x = x_0$ имеем $f(x) = f'(x_0)(x - x_0)$. Подставим это выражение в интеграл. Тогда после замены $y = f'(x_0)(x - x_0)$ получим соотношение, подтверждающее (17.8):

$$I = \int \varphi\left(x_0 + \frac{y}{f'(x_0)}\right) \frac{\delta(y)}{f'(x_0)} dy = \frac{\varphi(x_0)}{|f'(x_0)|}.$$

Производная δ -функции. В вычислениях иногда появляется производная δ -функции, $\delta'(x)$. В соответствии с общими правилами, эта производная определяется с помощью интегрирования по частям ($a < 0 < b$):

$$\int_a^b \delta'(x) g(x) dx = \delta(x) g(x) \Big|_a^b - \int \delta(x) g'(x) dx = -g'(0). \quad (17.9)$$

θ -функция и ε -функция. В дополнение к δ -функции определяют также две схожие ступенчатые функции

$$\theta(x) = \int_{-\infty}^x \delta(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0, \\ 1 & \text{при } x > 0 \end{cases} \quad (17.10a)$$

$$\varepsilon(x) \equiv \text{sign}(x) = \begin{cases} -1 & \text{при } x < 0, \\ 1 & \text{при } x > 0 \end{cases} \quad \Big| \quad = 2\theta(x) - 1 = \theta(x) - \theta(-x). \quad (17.10b)$$

Очевидно, что

$$d\theta(x)/dx = \delta(x), \quad d|x|/dx = \varepsilon(x). \quad (17.10в)$$

δ -функцию для трехмерного распределения $\delta(\mathbf{r})$ естественно определить соотношением

$$\int \delta(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) d^3r = f(0). \quad (17.11а)$$

Это означает, в частности, что в прямоугольных координатах

$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z). \quad (17.11б)$$

Таким образом, размерность функции $\delta(\mathbf{r})$ есть $[\ell]^{-3}$. Уже из этого ясно, что функция $\delta(\mathbf{r})$ не может совпадать с δ -функцией от радиуса $\delta(r)$, хотя не первый взгляд эти δ -функции имеют одинаковый смысл. Чтобы установить соответствие между этими функциями, найдем с помощью уравнения Пуассона плотность распределения заряда, отвечающую распределению потенциала

$$\phi(r) = q/r.$$

Начнем с не совсем аккуратного, но «естественного» вычисления. В этом случае распределение заряда так же, как и распределение потенциала обладает сферической симметрией, т. е. зависит только от r . Поэтому удобно записать уравнение Пуассона в сферических координатах, оставляя только радиальную часть оператора Лапласа:

$$\rho(r) = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\phi(r)}{dr} \right) = -\frac{1}{4\pi} \frac{1}{r^2} \frac{d\Phi}{dr} \quad \left(\Phi = r^2 \frac{d\phi(r)}{dr} \right).$$

Первая производная потенциала дает $\Phi = r^2(-q/r^2) = -q$. Дифференцирование константы дает ноль. Итак, пространственная плотность заряда оказалась равной нулю. Из результата исчез источник поля — точечный заряд в начале координат.

Неточность предыдущего вычисления состояла в неаккуратной записи исходного уравнения в сферических координатах. Действительно, в этих координатах значения r не могут быть отрицательными. Поэтому в сферических координатах потенциал следует записывать в виде $\phi = (q/r)\theta(r)$. Теперь дифференцирование дает последовательно

$$\Phi = -q\theta(r) + qr\delta(r), \quad d\Phi/dr = -q\delta(r) + q\delta(r) + qr\delta'(r) = qr\delta'(r).$$

В итоге мы получаем

$$\rho(\mathbf{r}) = -\frac{q}{4\pi r} \delta'(r).$$

С другой стороны, в случае точечного заряда, расположенного в начале координат, мы имеем $\rho(\mathbf{r}) = q\delta(\mathbf{r})$. Отсюда получается

$$\delta(\mathbf{r}) = -\frac{\delta'(r)}{4\pi r}. \quad (17.12)$$

Легко проверить, что такое выражение удовлетворяет определению (17.11).

17.2.3. Г-функция. Некоторые интегралы и ряды

- Г-функция определяется как интеграл

$$\Gamma(p) = a^p \int_0^{\infty} x^{p-1} e^{-ax} dx. \quad (17.13)$$

Полезные для нас свойства Г-функции:

$$\begin{aligned} \Gamma(p+1) &= p\Gamma(p), \quad \Gamma(n+1) = n! \quad (n \text{ — целое,}) \\ \Gamma(1/2) &= \sqrt{\pi}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-x^2} dx = \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right). \end{aligned} \quad (17.14)$$

При $x \gg 1$ имеем формулу (Стирлинга)

$$\Gamma(x+1) = \sqrt{2\pi x} \left(\frac{x}{e}\right)^x. \quad (17.15)$$

- При малых значениях x имеют место разложения в ряды:

$$\begin{aligned} (1+x)^a &= 1 + ax + \frac{a(a-1)}{2}x^2 + \dots; \\ thx &= x - \frac{x^3}{3} + \dots; \quad cthx = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{20} + \dots \end{aligned} \quad (17.16)$$

• Для суммирования хорошо сходящихся рядов иногда полезна формула Эйлера–Маклорена

$$\sum_{j=0}^{\infty} f(j) = \int_0^{\infty} f(j) dj + \frac{f(0)}{2} - \frac{f'(0)}{12} + \frac{f''(0)}{720} - \dots \quad (17.17)$$

17.2.4. Частные значения и свойства некоторых специальных функций

Перечислим некоторые свойства полиномов Лежандра $P_\ell(x)$ и функций Бесселя $J_n(x)$:

$$P_k(-x) = (-1)^k P_k(x), \quad P_k(1) = 1, \quad (17.18)$$

$$\frac{2\ell+1}{2} \int_0^\pi P_\ell(\cos\theta) P_m(\cos\theta) \sin\theta d\theta = \delta_{\ell m}. \quad (17.19)$$

$$\int_0^a x J_0(x) dx = a J_1(a), \quad (17.20)$$

$$P_k(\cos\theta) \rightarrow J_0(k\theta) \quad \text{при } k \rightarrow \infty. \quad (17.21)$$

$$J_n(x) \Rightarrow \begin{cases} (x/2)^n & \text{при } x \rightarrow 0; \\ \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi n}{2} - \frac{\pi}{4}\right) & \text{при } r \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (17.22)$$

Приведем теперь выражения нескольких радиальных функций атома водорода $R_{n,\ell}(r)$ (в атомных единицах). Эти функции удобно выразить через вспомогательные полиномы $K_{n,\ell}(r)$, вычисляемые с помощью рекуррентных соотношений (7.16) (при нормировке использованы соотношения (17.13), (17.14))

$$\begin{aligned} R_{n,\ell} &= \frac{2}{n^2} \frac{1}{\sqrt{(n+\ell)!}} \left(\frac{2r}{n}\right)^\ell e^{-r/n} \cdot K_{n,\ell}\left(\frac{r}{n}\right), \\ K_{n,n-1}(x) &= 1, \quad K_{n,n-2}(x) = 2(n-1) \left(1 - \frac{x}{n-1}\right), \\ K_{n,n-3}(x) &= \sqrt{(2n-3)(2n-4)} \left(1 - \frac{2x}{n-2} + \frac{2x^2}{(n-2)(2n-3)}\right). \end{aligned} \quad (17.23)$$

В частности, приведем несколько первых радиальных функций $\Phi_{n\ell}(x)$

$$\begin{aligned} R_{n\ell}(r) &\equiv e^{-r/n} \Phi_{n\ell}\left(\frac{r}{n}\right), \\ \Phi_{10} &= 2, \quad \Phi_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1-x), \quad \Phi_{21} = \frac{x}{\sqrt{6}}, \\ \Phi_{30} &= \frac{2}{3\sqrt{3}} \left(1 - 2x + \frac{2}{3}x^2\right), \quad \Phi_{31} = \frac{8x}{9\sqrt{6}} \left(1 - \frac{x}{2}\right), \quad \Phi_{32} = \frac{4x^2}{9\sqrt{30}}. \end{aligned} \quad (17.24)$$

С помощью радиальных функций (7.17) вычисляются и средние (7.20) и другие полезные средние значения

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \frac{3n^2 - \ell(\ell+1)}{2}, \quad \langle r^2 \rangle = \frac{n^2}{2} [5n^2 + 1 - 3\ell(\ell+1)], \\ \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle &= \frac{1}{n^2}, \quad \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{2}{n^3(2\ell+1)}, \quad \Delta r^2 = \frac{n^2(n^2+2) - \ell^2(\ell+1)^2}{4}. \end{aligned} \quad (17.25)$$

17.2.5. Некоторые операторные соотношения

В этом приложении мы перечислим некоторые важные соотношения для операторов, используемые в книге.

- Коммутатор одного оператора и произведения двух операторов получается простым вычислением

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]. \quad (17.26)$$

- Тожество Якоби для коммутаторов проверяется прямым вычислением

$$[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C}] + [[\hat{B}, \hat{C}], \hat{A}] + [[\hat{C}, \hat{A}], \hat{B}] = 0. \quad (17.27)$$

- Чтобы вычислить оператор $e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}}$, полезно рассмотреть вспомогательный оператор $\hat{A}(\eta) = e^{\eta\hat{B}}\hat{A}e^{-\eta\hat{B}}$ и найти для него дифференциальное уравнение. В итоге получается

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad (17.28)$$

При $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$ ответы упрощаются

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\hat{A}} = e^{\hat{R}}, \quad \text{где } R = e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}}, \quad (17.29)$$

$$e^{\eta(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\eta\hat{A}} e^{\eta\hat{B}} e^{-\eta^2[\hat{A}, \hat{B}]/2}. \quad (17.30)$$

17.2.6. Момент импульса в четырехмерном евклидовом пространстве

Начнем с обсуждения терминологии (ср. обсуждение после (6.3)).

Группу вращений трехмерного евклидова пространства обозначают как $O(3)$. Ей изоморфна группа преобразований двумерных унитарных матриц со следом, равным нулю, $SU(2)$. Генераторы преобразований этой группы – обсуждавшиеся в гл. 6 компоненты вектора момента импульса.

Группу вращений четырехмерного евклидова пространства обозначают как $O(4)$. Генераторы преобразований этой группы – естественные обобщения вектора момента импульса – образуют четырехмерный тензор момента импульса¹ (здесь, как обычно, $p_0 = -i\hbar\partial/\partial x_0$)

$$L_{\mu\nu} = x_\mu p_\nu - x_\nu p_\mu \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & t_x & t_y & t_z \\ -t_x & 0 & L_z & -L_x \\ -t_y & -L_z & 0 & L_y \\ -t_z & L_x & -L_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (17.31)$$

Поскольку $O(3) \in O(4)$, естественно, что L_x, L_y и L_z – компоненты обычного вектора момента импульса. Квадрат длины нашего тензора $L_{\mu\nu}L^{\mu\nu} = \mathbf{t}^2 + \mathbf{L}^2$.

Перестановочные соотношения между компонентами этого тензора легко получаются из их определений и имеют вид

$$\begin{aligned} [\hat{L}_i, \hat{L}_j] &= i\hbar e_{ijk} \hat{L}_k, & [\hat{L}_i, \hat{t}_j] &= i\hbar e_{ijk} \hat{t}_k, \\ [\hat{t}_i, \hat{t}_j] &= i\hbar e_{ijk} \hat{L}_k. \end{aligned} \quad (17.32)$$

17.2.7. Некоторые средние для атома водорода

Здесь мы получим формулы (13.9б), (13.9в) без громоздких вычислений.

Заметим сначала, что для любого оператора \hat{A} , зависящего только от r , среднее значение от его коммутатора с гамильтонианом радиального движения $\hat{H}_{0r} \equiv -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) - \frac{e^2}{r}$ по состояниям $|n j \ell\rangle$ обращается в ноль. В частности,

$$\langle n j \ell | \hat{C} | n j \ell \rangle = 0, \quad \text{где } \hat{C} = \left[\frac{d}{dr}, \hat{H}_{0r} \right].$$

¹Обратите внимание на сходство этого тензора с тензором электромагнитного поля так, что вектор \mathbf{t} отвечает полярному вектору \mathbf{E} , а вектор \mathbf{L} – аксиальному вектору \mathbf{H} . Различие с псевдоевклидовым пространством теории относительности – в метрике пространства, которая здесь не поминается. В частности, в теории относительности было бы $x_0 = ct$, $p_0 = E/c$, $L_{\mu\nu}L^{\mu\nu} = \mathbf{t}^2 - \mathbf{L}^2$, а t_x, t_y и t_z – компоненты трехмерного вектора буста, связанные с преобразованиями Лоренца вдоль каждой из осей x, y и z так же, как компоненты обычного момента импульса связаны с вращениями вокруг пространственных осей.

Прямое вычисление этого коммутатора дает

$$\hat{C} = \hat{C}_1 + \hat{C}_2 + \hat{C}_3, \quad \text{где} \quad \hat{C}_1 = \frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr}, \quad \hat{C}_2 = -\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{mr^3}, \quad \hat{C}_3 = -\frac{e^2}{r^2}.$$

Рассмотрим теперь каждое из средних $\langle nj\ell | \hat{C}_i | nj\ell \rangle$.

$$\text{Среднее } \langle |\hat{C}_3| \rangle \text{ было вычислено ранее, } \langle nj\ell | \hat{C}_3 | nj\ell \rangle = \frac{2e^2}{n^3(2\ell+1)a_B^2} \quad (7.20\Gamma).$$

Среднее $\langle |C_1| \rangle$ удобно преобразовать, переходя к волновым функциям атома водорода:

$$\langle nj\ell | \hat{C}_1 | nj\ell \rangle = \frac{\hbar^2}{m} \int d\Omega \int_0^\infty \psi_{n\ell}^* \frac{1}{r^2} \frac{d\psi_{n\ell}}{dr} r^2 dr = \frac{\hbar^2}{2m} \int d\Omega \int_0^\infty \frac{d|\psi_{n\ell}|^2}{dr} dr = -\frac{2\pi\hbar^2}{m} |\psi_{n\ell}|^2(0).$$

Наконец, среднее $\langle |C_2| \rangle$ пропорционально вспомогательной величине $\langle |1/r^3| \rangle$.

Поскольку $\langle nj\ell | (\hat{C}_1 + \hat{C}_2 + \hat{C}_3) | nj\ell \rangle = 0$, мы получили уравнение для определения интересующих нас величин

$$\frac{2\pi\hbar^2}{m} |\psi_{n\ell}|^2(0) + \left\langle nj\ell \left| \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{mr^3} \right| nj\ell \right\rangle (1 - \delta_{\ell 0}) = \frac{2e^2}{n^3(2\ell+1)a_B^2}.$$

При $\ell = 0$ в левой части остается только первое слагаемое, а при $\ell \neq 0$ — только второе слагаемое. В итоге получаются формулы (13.9б), (13.9в).

Литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1974.
2. Елютин П. В., Кривченков В. Д. Квантовая механика. — М.: Наука, 1976.
3. Мессиа А. Квантовая механика. — М.: Наука, 1978.
4. Липкин Г. Квантовая механика. — М.: Мир, 1977.
5. Дирак П. А. М. Основы квантовой механики. — М.: Физматгиз, 1960.
6. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. — М.: Мир, 1974. т. 1, 2.
7. Сербо В. Г., Хриплович И. Б. Квантовая механика. Новосибирск. — Новосибирск: НГУ, 2008.
8. Зелевинский В. Г. Лекции по квантовой механике. — Новосибирск: Сиб. универ. изд., 2002.
9. Медведев Б. В. Начала теоретической физики. — М.: Физматлит, 2007.
10. Гольдман И. И., Кривченков В. Д. Сборник задач по квантовой механике. — М.: ГТТИ, 1957.
11. Галицкий В. М., Карнаков Б. М., Коган В. И. Задачи по квантовой механике. — М.: Наука, 1992.
12. Коткин Г. Л., Ткаченко В. А., Ткаченко О. А. Компьютерный практикум по квантовой механике. Новосибирск. — Новосибирск: НГУ, 1996 (готовится переработанное издание).
13. Коткин Г. Л., Сербо В. Г., Черных А.И. Лекции по аналитической механике. — Новосибирск: НГУ, 2007
14. Фейнман Р., Хибс А. Квантовая механика и интегралы по траекториям. — М.: Мир, 1968.
15. Мигдал А. Б. Качественные методы в квантовой теории. — М.: Наука, физ.-мат., 1975.
16. Базь А. И., Зельдович Я.Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. — М.: Наука, ФМ, 1971.
17. Гинзбург И. Ф., Погосов А.Г. Электродинамика. (Релятивистское описание. Волновые явления). — Новосибирск: НГУ, 2010.