

И. Ф. Гинзбург

**Основы квантовой механики  
(нерелятивистская теория)**



Москва ♦ Ижевск

2018

УДК 530.145.6(075.8)

ББК 22.314я73

Г492

**Гинзбург И. Ф.**

Г492 Основы квантовой механики (нерелятивистская теория). — М.–Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2018. — 494 с.

ISBN 978-5-4344-0516-4

Пособие составлено на основе многолетнего опыта преподавания автором основного курса квантовой механики и чтения спецкурса «Дополнительные главы квантовой механики» в Новосибирском государственном университете. В основе построения курса — возможно более полное использование знаний, имеющихся у студентов-физиков и полученных в предшествующих курсах математики и физики. 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 (когерентные состояния, эффект Мёссбауэра, эффект Казимира, квантование колебаний решётки, неравенства Белла, эффект Ааронова–Бома, заряженный анизотропный осциллятор в магнитном поле, особенности описания эволюции квантовых систем с изменением Гильбертова пространства и др.).

Предназначено для студентов, изучающих квантовую механику.

**ББК 22.314я73**

**УДК 530.145.6(075.8)**

**ISBN 978-5-4344-0516-4**

© И. Ф. Гинзбург, 2018

© Ижевский институт компьютерных исследований, 2018

# Оглавление

Предисловие . . . . .	13
Основные обозначения . . . . .	17
<b>ГЛАВА 1. Основные понятия . . . . .</b>	<b>18</b>
§ 1.1. Введение . . . . .	18
§ 1.2. Аналогия с электродинамикой . . . . .	20
§ 1.3. Основные положения квантовой механики . . . . .	21
§ 1.4. Операторы. I. Общие свойства. Примеры . . . . .	25
§ 1.5. Векторы состояний и волновые функции . . . . .	27
§ 1.6. Операторы. II. Квантование . . . . .	33
§ 1.7. Одновременная измеримость и полный набор наблюда- емых . . . . .	38
§ 1.8. Оператор конечного сдвига, оператор импульса . . . . .	39
§ 1.9. Соотношение неопределённостей . . . . .	41
§ 1.10. Измерение в квантовой механике . . . . .	46
§ 1.11. Матрица плотности . . . . .	49
§ 1.12. Задачи . . . . .	52
<b>ГЛАВА 2. Состояния и их эволюция . . . . .</b>	<b>55</b>
§ 2.1. Уравнение Шредингера . . . . .	55
2.1.1. Эволюция состояния со временем . . . . .	57
2.1.2. Плотность тока вероятности . . . . .	58
2.1.3. Теорема о вириале . . . . .	59
§ 2.2. Сохраняющиеся величины. Симметрия и вырождение . . . . .	59
§ 2.3. Симметрия по отношению к отражениям. Чётность . . . . .	63
§ 2.4. Постановки задач для движения одной частицы . . . . .	64
2.4.1. Стационарные состояния . . . . .	64
2.4.2. Непрерывный спектр. Задача рассеяния . . . . .	65
§ 2.5. Одномерные задачи . . . . .	66
§ 2.6. Одномерная задача. Дискретный спектр . . . . .	69

2.6.1.	Прямоугольная потенциальная яма . . . . .	71
2.6.2.	Мелкая яма, $\delta$ -яма . . . . .	73
2.6.3.	Две $\delta$ -ямы. Туннелирование . . . . .	75
§ 2.7.	Непрерывный спектр. Задача рассеяния . . . . .	78
2.7.1.	Постановка задачи . . . . .	78
2.7.2.	Оптическая теорема. Общие свойства амплитуды . . . . .	79
2.7.3.	Примеры . . . . .	80
2.7.4.	Время задержки волны на потенциале . . . . .	83
§ 2.8.	Квазистационарные состояния. Нестабильные частицы . . . . .	83
2.8.1.	Грубая модель распада . . . . .	88
2.8.2.	Виртуальный уровень . . . . .	91
2.8.3.	Особенности рассеяния волнового пакета . . . . .	91
§ 2.9.	Некоторые правила сумм . . . . .	92
§ 2.10.	Задачи . . . . .	94
<b>ГЛАВА 3.</b>	<b>Зависимость операторов от времени . . . . .</b>	<b>98</b>
§ 3.1.	Оператор эволюции системы со временем. Функция Грина . . . . .	98
§ 3.2.	Гайзенберговская картина . . . . .	99
§ 3.3.	Производная оператора по времени . . . . .	100
§ 3.4.	Сложные системы. Представление взаимодействия . . . . .	102
§ 3.5.	Задачи . . . . .	103
<b>ГЛАВА 4.</b>	<b>Гармонический осциллятор . . . . .</b>	<b>105</b>
§ 4.1.	Одномерный осциллятор. Операторный метод . . . . .	105
4.1.1.	Границы применимости . . . . .	109
4.1.2.	Оператор отражения координат любой системы . . . . .	110
4.1.3.	Зависимость операторов от времени . . . . .	111
§ 4.2.	Координатное представление . . . . .	112
4.2.1.	Применение операторного метода . . . . .	112
4.2.2.	Решение дифференциального уравнения . . . . .	113
§ 4.3.	Двумерный осциллятор . . . . .	114
§ 4.4.	«Нулевые колебания» осциллятора и их наблюдение . . . . .	116
§ 4.5.	Когерентные состояния . . . . .	121
§ 4.6.	Задачи . . . . .	125
<b>ГЛАВА 5.</b>	<b>Методы приближений. I . . . . .</b>	<b>127</b>
§ 5.1.	О приближённых методах квантовой механики . . . . .	127

§ 5.2.	Вариационный метод . . . . .	128
§ 5.3.	Теория возмущений. Общее рассмотрение . . . . .	130
§ 5.4.	Теория возмущений. Невырожденный случай . . . . .	131
5.4.1.	Производная энергии по параметру . . . . .	132
5.4.2.	Примеры. Возмущения для гармонического осциллятора. Тепловое расширение кристаллов . . . . .	132
5.4.3.	Условия применимости . . . . .	135
§ 5.5.	Теория возмущений при наличии вырождения . . . . .	136
§ 5.6.	Задачи . . . . .	141
<b>ГЛАВА 6. Методы приближений. II. Квазиклассический случай . . . . .</b>		
§ 6.1.	Волновая функция. Условие применимости приближения . . . . .	145
§ 6.2.	Правила квантования Бора–Зоммерфельда. I . . . . .	147
§ 6.3.	Условия сшивки . . . . .	151
§ 6.4.	Правила квантования Бора–Зоммерфельда. II . . . . .	154
§ 6.5.	Прохождение сквозь барьер . . . . .	155
6.5.1.	Теория $\alpha$ -распада . . . . .	157
§ 6.6.	Задачи . . . . .	158
<b>ГЛАВА 7. Периодическое поле. Кристаллические цепочки</b>		
§ 7.1.	Основные понятия . . . . .	161
§ 7.2.	Движение в периодическом поле. Общее описание . . . . .	162
§ 7.3.	Формирование зон . . . . .	163
7.3.1.	Матрица перехода . . . . .	163
7.3.2.	Периодические граничные условия . . . . .	166
7.3.3.	Примеры . . . . .	167
§ 7.4.	От бесконечной решётки к конечной . . . . .	172
§ 7.5.	Структура решений в некоторых случаях . . . . .	175
7.5.1.	Случай сильной связи . . . . .	175
7.5.2.	Случай слабой связи . . . . .	177
§ 7.6.	Качественная картина . . . . .	179
§ 7.7.	Следствия нарушения периодичности . . . . .	181
7.7.1.	Ещё о конечных цепочках . . . . .	181
7.7.2.	Нарушения периодичности . . . . .	182
§ 7.8.	Малые колебания линейных цепочек . . . . .	184
7.8.1.	Цепочка одноатомных молекул . . . . .	185

7.8.2.	Цепочка двухатомных молекул . . . . .	188
§ 7.9.	Квазичастицы . . . . .	193
§ 7.10.	Эффект Мёссбауэра . . . . .	193
§ 7.11.	Задачи . . . . .	196
ГЛАВА 8.	<b>Момент импульса</b> . . . . .	198
§ 8.1.	Следствия алгебры коммутаторов . . . . .	201
§ 8.2.	Состояния с моментом $\ell = 1$ . . . . .	206
§ 8.3.	Следствия координатной записи . . . . .	206
§ 8.4.	Задачи . . . . .	211
ГЛАВА 9.	<b>Центрально–симметричное поле</b> . . . . .	213
§ 9.1.	Задача двух тел. Общие свойства . . . . .	213
§ 9.2.	Поле, быстро убывающее с расстоянием . . . . .	217
§ 9.3.	Кулоновская задача. Атом водорода . . . . .	219
9.3.1.	Атомы и молекулы в электрическом поле . . . . .	226
9.3.2.	Взаимодействие нейтральных атомов . . . . .	230
§ 9.4.	Повышенная симметрия некоторых трёхмерных систем . . . . .	231
9.4.1.	Изотропный осциллятор . . . . .	232
9.4.2.	Кулоновская задача. Метод Паули . . . . .	233
§ 9.5.	Задачи . . . . .	236
ГЛАВА 10.	<b>Спин</b> . . . . .	239
§ 10.1.	Основные факты . . . . .	239
§ 10.2.	Частицы со спином $1/2$ . Спиноры . . . . .	240
§ 10.3.	Разложение по базису матриц Паули как технический прием . . . . .	243
§ 10.4.	Задачи . . . . .	244
ГЛАВА 11.	<b>Движение в магнитном поле</b> . . . . .	246
§ 11.1.	Магнитный момент частицы . . . . .	246
§ 11.2.	Уравнение Шредингера — уравнение Паули . . . . .	248
§ 11.3.	Калибровочная инвариантность . . . . .	249
§ 11.4.	Движение в магнитном поле . . . . .	251
11.4.1.	Переход к магнитному моменту . . . . .	252
11.4.2.	Электрон в однородном магнитном поле. I . . . . .	253
11.4.3.	Электрон в однородном магнитном поле. II . . . . .	256
11.4.4.	Движение в скрещенных электрическом и магнитном полях . . . . .	258

11.4.5. Двумерный осциллятор в магнитном поле . . .	259
§ 11.5. Движение спина в магнитном поле . . . . .	262
§ 11.6. Эффект Ааронова–Бома . . . . .	264
§ 11.7. Задачи . . . . .	266
<b>ГЛАВА 12. Сложение моментов . . . . .</b>	<b>268</b>
§ 12.1. Сложение моментов . . . . .	268
12.1.1. Регулярный метод . . . . .	270
12.1.2. Другие методы вычисления коэффициентов . . . . .	275
§ 12.2. Матричные элементы скаляров и векторов . . . . .	277
12.2.1. Правила отбора . . . . .	277
12.2.2. Усреднение векторного оператора . . . . .	280
§ 12.3. Задачи . . . . .	281
<b>ГЛАВА 13. Тождественность частиц . . . . .</b>	<b>283</b>
§ 13.1. Волновая функция системы тождественных частиц . . . . .	283
§ 13.2. Обменное взаимодействие . . . . .	286
§ 13.3. Параводород и ортоводород . . . . .	288
§ 13.4. Задачи . . . . .	289
<b>ГЛАВА 14. Вторичное квантование . . . . .</b>	<b>291</b>
§ 14.1. Понятие о вторичном квантовании . . . . .	291
§ 14.2. Квантование электромагнитного поля . . . . .	294
14.2.1. Неквантованное электромагнитное поле . . . . .	294
14.2.2. Электромагнитное поле в кубической полости. Осцилляторы поля . . . . .	297
14.2.3. Квантование поля . . . . .	297
§ 14.3. Системы с взаимодействием . . . . .	301
<b>ГЛАВА 15. Атомы, молекулы, ядра . . . . .</b>	<b>304</b>
§ 15.1. Атомы . . . . .	305
15.1.1. Самосогласованное поле. Электронные конфигурации . . . . .	305
15.1.2. Корреляционные силы. Правила Хунда . . . . .	308
15.1.3. Атом гелия . . . . .	309
15.1.4. Спин–орбитальное взаимодействие . . . . .	311
15.1.5. Малые поправки . . . . .	314
15.1.6. Периодическая система элементов . . . . .	316
15.1.7. Атом в магнитном поле . . . . .	319

15.1.8. Атомы с большим числом электронов . . . . .	325
§ 15.2. Молекулы . . . . .	328
15.2.1. Типы связей . . . . .	329
15.2.2. Колебательные и вращательные уровни . . . . .	330
§ 15.3. Атомное ядро. Ядерные силы . . . . .	333
15.3.1. Модели строения ядра . . . . .	337
15.3.2. Ядерные распады . . . . .	341
15.3.3. Использование ядерной энергии . . . . .	342
§ 15.4. Задачи . . . . .	343
<b>ГЛАВА 16. Системы с гамильтонианом, зависящим от времени . . . . .</b>	<b>345</b>
§ 16.1. Постановка вопроса . . . . .	345
§ 16.2. Уравнение Шредингера в представлении взаимодействия . . . . .	347
§ 16.3. Теория возмущений . . . . .	349
16.3.1. Возбуждение атома водорода пролетающим ионом . . . . .	352
§ 16.4. Скачкообразное изменение гамильтониана . . . . .	355
§ 16.5. Периодическое возмущение . . . . .	357
16.5.1. Нерезонансное возмущение . . . . .	358
16.5.2. Почти резонансное возмущение . . . . .	358
§ 16.6. Переходы в непрерывный спектр . . . . .	359
16.6.1. Плотность числа состояний . . . . .	361
16.6.2. Переходы в слабом периодическом поле . . . . .	362
§ 16.7. Фотоэффект . . . . .	364
§ 16.8. Адиабатический случай . . . . .	366
§ 16.9. Задачи . . . . .	367
<b>ГЛАВА 17. Испускание и поглощение излучения . . . . .</b>	<b>369</b>
§ 17.1. Излучение и поглощение света . . . . .	369
17.1.1. Коэффициенты Эйнштейна . . . . .	370
17.1.2. Вероятность излучения. Подход Ферми . . . . .	371
17.1.3. Излучение света. Квантованные поля . . . . .	372
§ 17.2. Излучение высших мультиполей . . . . .	375
§ 17.3. Правила отбора для излучения . . . . .	378
§ 17.4. Ширина спектральной линии . . . . .	379

17.4.1. Собственная ширина уровня. Что такое наблюдаемый фотон . . . . .	379
17.4.2. Наблюдаемая ширина спектральной линии . . . . .	382
§ 17.5. Принципы работы лазеров. Простейший вариант . . . . .	383
§ 17.6. Задачи . . . . .	385
<b>ГЛАВА 18. Рассеяние . . . . .</b>	<b>386</b>
§ 18.1. Постановка задачи. Общие соотношения . . . . .	386
18.1.1. Амплитуда рассеяния. Сечение рассеяния . . . . .	386
18.1.2. Оптическая теорема . . . . .	390
18.1.3. Конечность полного сечения . . . . .	391
§ 18.2. Интегральная форма уравнения Шредингера . . . . .	392
§ 18.3. Борновское приближение . . . . .	393
18.3.1. Первое борновское приближение . . . . .	394
18.3.2. Критерий применимости приближения . . . . .	395
18.3.3. Рассеяние на потенциале Юкавы . . . . .	397
18.3.4. Формула Резерфорда . . . . .	397
18.3.5. Атомный формфактор . . . . .	398
18.3.6. Возможное видоизменение . . . . .	401
§ 18.4. Рассеяние при больших энергиях. Приближение эйконала . . . . .	401
§ 18.5. Разложение по парциальным волнам . . . . .	403
18.5.1. Фазы рассеяния и парциальные амплитуды . . . . .	403
18.5.2. Упругое рассеяние медленных частиц . . . . .	406
18.5.3. Резонансное рассеяние . . . . .	408
§ 18.6. Особенности рассеяния частиц со спином . . . . .	409
§ 18.7. Особенности рассеяния заряженных частиц . . . . .	411
§ 18.8. Рассеяние при наличии неупругости . . . . .	412
18.8.1. Общие соотношения. Канал упругого рассеяния . . . . .	413
18.8.2. Неупругие процессы . . . . .	414
18.8.3. Рассеяние быстрых частиц на сером шаре . . . . .	415
§ 18.9. Ограничения подхода . . . . .	417
§ 18.10. Задачи . . . . .	419
<b>Приложение А. Квантовая механика на компьютере . . . . .</b>	<b>421</b>
§ А.1. Постановка задачи . . . . .	421
§ А.2. Свободное движение. Волновой пакет . . . . .	422
§ А.3. Простая яма или барьер и пара ям . . . . .	423

§ A.4. Набор ям. Периодическое поле . . . . .	425
§ A.5. Движение в центральном поле . . . . .	428
<b>Приложение В. Математические дополнения . . . . .</b>	<b>430</b>
§ В.1. $\delta$ -функция, $\theta$ -функция . . . . .	430
§ В.2. $\Gamma$ -функция. Некоторые интегралы и ряды . . . . .	434
§ В.3. Свойства некоторых специальных функций . . . . .	435
§ В.4. Средние значения $\langle r^k \rangle_{nl}$ для атома водорода . . . . .	436
§ В.5. Оператор $e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}}$ . Проекционные операторы . . . . .	438
§ В.6. О векторном анализе . . . . .	439
§ В.7. Момент импульса в четырёхмерном евклидовом пространстве . . . . .	440
§ В.8. Метод комплексной плоскости для получения правил сшивки в квазиклассическом приближении . . . . .	441
<b>Приложение С. Скрытые параметры и квантовая механика . . . . .</b>	<b>446</b>
<b>Приложение D. Переходы с изменением Гильбертова пространства . . . . .</b>	<b>450</b>
§ D.1. Постановка задачи . . . . .	450
§ D.2. Регуляризация . . . . .	451
§ D.3. Новое явление . . . . .	453
D.3.1. Замечание о возможных применениях. Проблемы для исследования . . . . .	454
§ D.4. Методы вычисления . . . . .	455
<b>Приложение E. Классическое понимание спина фотона . . . . .</b>	<b>458</b>
<b>Приложение F. Некоторые дополнения . . . . .</b>	<b>460</b>
§ F.1. Замечание о степенном потенциале . . . . .	460
§ F.2. Квазистационарные состояния в разных подходах . . . . .	461
F.2.1. Квазистационарные состояния на паре $\delta$ -пикув. . . . .	461
F.2.2. Квазистационарные состояния в квазиклассическом приближении . . . . .	464
§ F.3. Двойная яма. Квазиклассическое приближение . . . . .	466
§ F.4. Надбарьерное отражение . . . . .	470
§ F.5. Уровни Ландау в цилиндрических координатах . . . . .	471
§ F.6. Тонкая структура уровней атома водорода . . . . .	472

Приложение G. <b>Фундаментальные частицы и взаимодей-</b> <b>ствия. Что дальше</b> . . . . .	476
§ G.1. О релятивистской квантовой теории. Античастицы .	476
§ G.2. Элементарные частицы . . . . .	479
§ G.3. Фундаментальные взаимодействия . . . . .	485
<b>Литература</b> . . . . .	490
<b>Повторяющиеся обозначения и некоторые константы</b> .	492



# Предисловие

Первая версия этой книги была издана издательством НГУ в 2012 г. Предлагаемый текст подвергся многочисленным изменениям.

Среди множества учебников по квантовой механике каждая из книг [1–11] демонстрирует свой подход к курсу и решает множество интересных задач. Оригинальный подход к построению теории содержится в книге Р. Фейнмана и А. Хибса [12], которая заслуживает специального чтения студентами, ориентирующимися на изучение фундаментальной теории. Книги [13, 14] посвящены качественным методам квантовой механики в их применении к самым разным вопросам физики. Их изучение доставит удовольствие читателю. Современное изложение истории квантовой механики можно найти в книге [15].

Предлагаемый текст отличается от известных мне книг отбором материала и манерой изложения отдельных тем. Я счёл полезным включить сюда и часть материала, обычно обсуждаемого только на практических занятиях. Многие разделы, приложения, примечания и даже абзацы добавлены для спецкурсов и интересующихся студентов. Получившийся в итоге текст значительно больше стандартного годового курса. Отбор минимально необходимого для освоения материала — предмет выбора преподавателя и (или) самостоятельного читателя.

В пособии подробно обсуждаются теоретические вопросы, связанные с основами теории. В то же время это — часть курса ФИЗИКИ, — науки о природе. Поэтому важную роль играют оценки области применимости получаемых результатов к описанию реальных явлений.

В основе построения курса — возможно более полное использование знаний, имеющихся у студентов-физиков и полученных в предшествующих курсах математики и физики. Я счёл полезным включить ссылки на эти курсы. Я учитываю, что современный студент «из газет» знает о существовании волновой функции, о дискретных уровнях энергии, о существовании квантов света, . . . Поэтому в начале курса нет традиционного описания экспериментального материала, послужившего мотивом к изобретению квантовой механики, основное внимание

в начале книги я обращаю на выяснение того, что же значат появляющиеся новые понятия и как ими пользоваться.

Одним из элементов различия с другими курсами квантовой механики является отношение к вычислительной части. Исторически сложилось так, что важной частью фундаментального курса было коллекционирование случаев, в которых уравнение Шредингера решается точно. Каждая из таких задач представляет собой отдельную жемчужину теории дифференциальных уравнений, дающую лишь небольшой опыт для решения новых задач. На мой взгляд, коллекция точно решаемых уравнений ныне важна лишь для ценителей. Поэтому привычные аналитические методы я по возможности заменяю на операторные.

По той же причине я постарался как можно раньше рассмотреть пакет приближённых методов квантовой механики, чтобы использовать их при обсуждении конкретных физических систем. Вообще, порядок изложения отдельных разделов курса диктуется больше логикой преподавания, чем логикой каких-то «аксиом» или историей вопроса.

Традиционно курс квантовой механики является введением в курсы *атомной физики* и *физики твёрдого тела*. Предлагаемое пособие не является исключением. Соответствующие разделы не претендуют на полноту. Их роль — в том, чтобы, встретившись с соответствующими понятиями в специальной литературе, читатель мог бы без особого труда понять, о чем идет речь, и сравнительно легко изучить соответствующую специальную литературу. Мне кажется, что излагаемая версия рассказа о движении в периодическом поле более прозрачна и продвинута, чем многие известные варианты. Она позволила дать простое описание перехода от конечной цепочки к бесконечной.

Хотя основное содержание книги относится к нерелятивистской теории, я нашёл полезным при описании атомных систем активно использовать постоянную тонкой структуры  $\alpha = e^2/(\hbar c)$ .

Замечу, что слова «нерелятивистская теория» в названии означают отказ от изучения **всего** комплекса взаимопревращений частиц (рождения, аннигиляции и т. п.). Тем не менее мы обсуждаем отдельные задачи с рождением и аннигиляцией и некоторые явления, происходящие при субсветовых скоростях.

Полезно обратить внимание на существенное отличие релятивистских квантовых задач от нерелятивистских. В нерелятивистской теории универсальное уравнение Шредингера применимо для описания любой системы, надо лишь найти соответствующий потенциал. В ре-

лятивистской теории такого универсального уравнения нет (уравнения для частиц со спином 0 и  $1/2$  принципиальным образом различаются). Более того, в большинстве содержательных 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 её частные случаи — *квантовая электродинамика*, *квантовая хромодинамика* (теория ядерных сил), *электрослабая теория (объединённая теория электромагнитных и слабых взаимодействий)*, ... Поэтому построение курса релятивистской квантовой механики, безотносительно от рассматриваемых частиц и взаимодействий, представляется мне не очень продуктивным. В то же время введение в атомную физику было бы неполным без описаний явлений излучения в нерелятивистской области движения частиц. Это обусловило выделение соответствующих вопросов в отдельную главу 17.

При наличии прекрасных задачников по квантовой механике [16–18] я счел необходимым включить задачи в состав пособия. Задачи составляют существенную часть курса.

В НГУ создан замечательный пакет программ `quantx` для упражнений по квантовой механике, с дружественным интерфейсом [19]. 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 перечень типичных заданий содержатся в основном тексте и в приложении А.

Я счел полезным собрать в приложении В некоторые математические факты, либо не очень хорошо известные студентам, либо часто забываемые — в таких формулировках, которые необходимы физике. В приложениях С–Е я поместил обсуждения принципиальных вопросов квантовой теории, выходящих за пределы, необходимые для первого изучения предмета. Приложение F содержит некоторые примеры и дополнения, иллюстрирующие основной материал или демонстрирующий его применения к отдельным задачам. Часть этого материала полезно разбирать на семинарских занятиях. В приложении G я даю краткий очерк современной теории частиц и космологии.

При работе над книгой я осознал существование некоторых, иногда очень глубоких, задач, решения которых до сих пор, кажется, не

известны. Я не удержался от включения некоторых из них в книгу (разд. D.3.1 и задача 16.7).

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 естественнонаучных задач в целом. На постулатах квантовой механики основаны идеи квантового компьютера и квантового кодирования, принципиально недоступного для посторонних.

- Выпускники наших ВУЗов в частности должны быть высококультурными потребителями сложного оборудования, им следует чувствовать, когда производители этого оборудования пытаются их обмануть. В связи с этим я обычно привожу такой пример. В 1980 г. я читал лекции в Новосибирском институте связи (ныне *СибГУТИ*). Увидев однажды у студентов учебник по электронным приборам, я попросил у них книгу, открыл её на разделе «Туннельный диод» и прочел: «*туннельный диод работает со скоростью света*». Если выпускник освоил основные идеи курса, он должен немедленно понять, что подобное утверждение — обман (или следствие малограмотности автора, или жульничество).

Я благодарен моим коллегам и студентам за интересные вопросы и обсуждения, повлиявшие на изложение, за замечания и указания неточностей (среди них особенно полезными были замечания Г.Н. Шестакова). Записи В.Г. Сербо и И.Б. Хрипловича, постепенно преобразовавшиеся в [7], послужили спусковым механизмом для написания этой книги. Мои особые благодарности А.Г. Грозину, который прочёл всю первую версию книги и заметил много неточностей и немало ошибок.

Этот текст вряд ли свободен от опечаток и неясных мест (надеюсь, что их осталось мало). Я заранее благодарен читателям, которые сообщат об этих погрешностях по адресу [ginzburg@math.nsc.ru](mailto:ginzburg@math.nsc.ru), что может быть исправлено в возможном повторном издании книги.

Новосибирск, 2018 г.

## Основные обозначения

Всюду в тексте векторы выделяются «жирным» шрифтом, по повторяющимся индексам предполагается суммирование. «Длины» этих векторов обозначаются той же буквой обычным шрифтом.

Во избежание путаницы, электрическое и магнитное поля часто обозначаются каллиграфическими буквами  $\mathcal{E}$  и  $\mathcal{B}$ , а не  $E$  и  $B$ .

$\propto$  — знак пропорциональности;

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

*v.p.* — главное значение;

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

$E, \mathbf{p}$  — энергия и импульс частицы;

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

Ссылка на задачу имеет вид X.N, где X — номер главы, N — номер задачи в ней, так, задача 1.9 — это задача 9 к гл. 1. Ссылки на литературу обозначаются номером в квадратных скобках, например, [2].

# 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 микроскопической частицы описывается волновой функцией  $\psi(x, t)$ .**

Поначалу для нас важно только, что  $\psi$  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*<sup>1</sup>

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

Отличие квантового поведения от классического становится существенным, когда величины той же размерности, что и квант действия (например, момент импульса и произведение изменения энергии на время взаимодействия), не слишком велики по сравнению с  $\hbar$ . Если же такие величины намного 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 не может быть доказана какими-либо экспериментами или логическими построениями.*

---

<sup>1</sup>В оригинальной работе Планк ввёл величину  $h = 2\pi\hbar$ .

Она подтверждается уверенным функционированием множества устройств, действие которых основано на её законах (устройства твердотельной электроники, лазеры, детекторы элементарных частиц и т. п.). Поэтому я не нахожу нужным начинать курс 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.).

*Этот 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 методами приближений, которые позволят отыскивать ответы в большинстве физически интересных проблем.
- Новые подходы к постановке и решению задач квантовой механики должны войти в интеллектуальный багаж слушателей, используемый 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*

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

*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 приближённо

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

Простой пример волнового пакета даёт случай  $A(k) = (1/2\Delta k)$  при  $k_0 - \Delta k < k < k_0 + \Delta k$  — одномерный «купол» в виде прямоугольника.

При  $\Delta k \ll |k_0|$  имеем

$$\psi(x, t) = \frac{1}{2\Delta k} \int_{-\Delta k}^{\Delta k} e^{i(qx - \omega t)} dq \approx \frac{\sin[(x - u_g t)\Delta k]}{(x - u_g t)\Delta k}.$$

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

Входящие в пакет разные гармоники имеют разные фазовые скорости  $\omega/k$ . При движении некоторые компонент из них бегут быстрее центра тяжести, а другие отстают. Поэтому со временем размер пакета увеличивается, пакет *расплывается*<sup>1</sup>.

## § 1.2. Аналогия с электродинамикой

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

$$\mathcal{F}^\dagger = (\mathcal{E}_1^*, \mathcal{E}_2^*, \mathcal{E}_3^*, \mathcal{B}_1^*, \mathcal{B}_2^*, \mathcal{B}_3^*)$$

и столбец  $\mathcal{F}$  с теми же компонентами, не претерпевшими комплексного сопряжения, — аналоги  $\psi^*(\mathbf{x}, t)$  и  $\psi(\mathbf{x}, t)$ . (Если используется действительное представление для полей, то столбец получается из строки простым транспонированием.) Тогда энергию поля  $W$  и его импульс  $\mathbf{P}$  можно записать в виде (не путайте тензор Леви-Чивита  $e_{ijk}$  и тензор диэлектрической проницаемости  $\varepsilon_{ij}$ )

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{8\pi} \int d^3x (\mathcal{D}\mathcal{E} + \mathcal{B}\mathcal{H}) \rightarrow \frac{1}{8\pi} \sum_{i,j} \int d^3x (\mathcal{E}_i \varepsilon_{ij} \mathcal{E}_j + \mathcal{B}_i (\mu^{-1})_{ij} \mathcal{B}_j) \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{1}{16\pi} \int d^3x (\mathcal{E}_i^* \varepsilon_{ij} \mathcal{E}_j + \mathcal{B}_i^* (\mu^{-1})_{ij} \mathcal{B}_j) \equiv \sum_{\alpha,\beta} \int d^3x (\mathcal{F}_\alpha^\dagger \hat{W}_{\alpha\beta} \mathcal{F}_\beta), \\ \mathbf{P} &= \frac{1}{4\pi c} \int d^3x [\mathcal{E} \times \mathcal{B}]; \quad P_i = \frac{1}{4\pi c} \int d^3x \mathcal{E}_j e_{ijk} \mathcal{B}_k \Rightarrow \\ &\Rightarrow \frac{1}{8\pi c} \int d^3x \mathcal{E}_j^* e_{ijk} \mathcal{B}_k \equiv \sum_{\alpha,\beta} \int d^3x (\mathcal{F}_\alpha^\dagger \hat{P}_{i\alpha\beta} \mathcal{F}_\beta). \end{aligned} \quad (1.3)$$

<sup>1</sup>Если зависимость фазовой скорости от энергии немонотонна, то изменение формы пакета при его движении не сводится к простому расплыванию (см. разд. 2.8.3).

В последних выражениях этой формулы введены матрицы (они же — операторы)  $\hat{W}$  и  $\hat{P}$ , чьими элементами служат матрицы  $(3 \times 3)$   $e_{ijk} \equiv e_{jk}^i$ ,  $\varepsilon_{ij}$ ,  $(\mu^{-1})_{ij}$  и 0:

$$\text{где } \hat{W} = \frac{1}{16\pi} \begin{Bmatrix} \varepsilon_{ij} & 0 \\ 0 & (\mu^{-1})_{ij} \end{Bmatrix}, \quad \hat{P}_i = \frac{1}{8\pi c} \begin{Bmatrix} 0 & e_{i,j,k-3} \\ e_{i,j-3,k} & 0 \end{Bmatrix}.$$

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

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

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

### § 1.3. Основные положения квантовой механики

В квантовой теории изложенный выше подход прямо переносится на описание явлений микромира.

Наблюдаемые значения физических величин определяются билинейными формами от волновой функции. Каждой физической величине  $A$  соответствует свой способ построения этой билинейной формы — свой оператор  $\hat{A}(t)$ , так что среднее значение величины  $A(t)$  в состоянии, описываемом волновой функцией  $\psi(x)$ , есть

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

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

(i) Обычно квантовая механика предсказывает не точные значения каких-то величин, а лишь их вероятности или средние значения. Никакие уточнения условий опыта не могут сделать предсказания более точными, чем некоторые предельные значения. Этим квантовая теория принципиально отличается от классической (например, молекулярной физики), в которой (статистическая) неопределённость возникает просто от недостаточности или неточности нашего знания.

Простейший пример даёт дифракция света, проходящего через пару отверстий, если рассматривать свет как совокупность фотонов. Один фотон, пройдя через эти отверстия, в конце концов взаимодействует с одним светочувствительным ионом пластинки и даёт на ней тёмное пятнышко. Положение каждого пятнышка нельзя предсказать, можно указать только вероятность его появления. Дифракционная картина возникает как сумма пятнышек от множества отдельных фотонов, распределение плотностей почернения отвечает упоминавшемуся распределению вероятностей, которое можно предсказать. Казалось бы, в каждом случае по положению пятна на фотопластинке можно указать: этот фотон прошёл 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.

Вообще, некоторые вопросы, которые кажутся естественными с классической точки зрения, лишены точного смысла в квантовой теории. Известный пример — это вопрос, *какова скорость частицы в тот момент, когда она находится в заданной точке?* Он схож с вопросом: *Вы идёте с компанией друзей. Какова скорость этой компании в тот момент, когда Вы проходите мимо двери данного кафе?* На каждый из этих вопросов можно получить приближённый ответ. Отличие ситуации в квантовой механике от ситуации с компанией состоит в том, что во втором случае можно хорошо организовать компанию и получить ответ с желаемой точностью. В квантовой теории неточность ответа является фундаментальным свойством. Погрешности измерения координаты и импульса невозможно одновременно сделать сколь угодно малыми, они связаны *соотношением неопределённостей* § 1.9, определяющим *квантовый предел погрешности измерения*, который нельзя превзойти с помощью усовершенствования приборов.

(*ii*) Новой идеей квантовой механики является использование в её вычислениях, помимо привычных *наблюдаемых величин*, ещё и вспомогательных, *принципиально ненаблюдаемых величин*. В разных подходах значения этих ненаблюдаемых величин могут различаться. Теория должна однозначно описывать наблюдаемые величины (такие, как энергии излучённых частиц, потоки рассеянных частиц и т.п.), но не обязана однозначно отвечать на **любезные задающему** вопросы о ненаблюдаемых объектах, и в частности, о промежуточном состоянии. 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.

◇ **О корпускулярно–волновом дуализме и т. п.** Изучающие квантовую механику и обыватели нередко спрашивают:

— *так электрон — это волна или частица?, как можно представить себе корпускулярно–волновой дуализм?*

Ответ состоит в том, что вопросы плохо поставлены.

Физические явления на малых расстояниях не обязаны допускать описание в привычных нам классических терминах. Мы же («потребители») описываем явления на привычном нам классическом языке, в котором, в частности, понятия волны и частицы представляются принципиально различными. (Это различие вызывало 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, иногда удобен синтез обоих описаний. *Не существует динамической теории классического типа, содержащей некоторые пока не известные нам переменные (скрытые параметры), в которой все результаты предсказываются однозначно, а квантовая механика с её вероятностными предсказаниями возникала бы как результат усреднения по этим скрытым параметрам.* Эксперимент, изобретенный для проверки этого утверждения (*J. S. Bell*), и его результаты обсуждаются в приложении С.

**Основные положения квантовой механики  
для изолированной системы**

1. Состояние описывается с помощью **ненаблюдаемой величины** — волновой функции  $\psi(x)$ . Для системы, заключённой в конечном объёме, волновая функция принадлежит пространству  $L_2$  квадратично интегрируемых функций, т. е.  $\int |\psi(x)|^2 dx$  сходится. Для изолированной системы это — полное описание.
2. Предсказания квантовой механики носят статистический характер. Почти всегда предсказать можно только средние значения большой серии испытаний для одинаково приготовленных систем.
3. Динамические переменные описываются с помощью операторов  $\hat{A}$  так, что их (**наблюдаемые**) средние значения определяются соотношением вида  $\langle A \rangle = \int d^3x \psi^*(\mathbf{x}) \hat{A} \psi(\mathbf{x})$  (1.4).
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:** Если физическая ситуация допускает движение в неограниченном пространстве, волновые функции вообще говоря не принадлежат пространству  $L_2$ , но они реализуются только в более или менее локализованных волновых пакетах, которые принадлежат к пространству  $L_2$  (И. М. Гельфанд, В. М. Галицкий).

*Замечания к основным положениям*

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

(ii) Принцип суперпозиции означает, что уравнение, описывающее эволюцию волновой функции со временем, должно быть линейным по  $\psi$  (см. гл. 2).

(iii) Существование принципа суперпозиции показывает, что волновая функция определяется только с точностью до нормировки. Для квадратично интегрируемых функций эту нормировку **обычно выбирают** так, что  $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$ . Это интерпретируется как утверждение,

что изучаемая частица с вероятностью 1 находится где-то в изучаемой области пространства.

(iv) Принцип соответствия однозначно работает только в одну сторону: он описывает переход от квантовой задачи к классической. Переход от классической задачи к квантовой с точки зрения принципа соответствия не однозначен. Квантовые величины, которые получаются по законам классической теории, определяются с точностью до слагаемых, пропорциональных кванту действия  $\hbar$ . Эти слагаемые исчезают в классическом пределе.

(v) Постулат пакетности важен при понимании задач непрерывного спектра, он составляет фактическую основу применений квантовой механики в задачах рассеяния, см. замечание на стр. 29, гл. 18 и § 18.5.

## § 1.4. Операторы. I. Общие свойства. Примеры

*Заметная часть изложения в последующем тексте этой главы воспроизводит факты, известные из курса «ФУНКЦИОНАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ».*

**Собственные значения  $\lambda$  и собственные функции  $\psi_\lambda$  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 числового аргумента  $F(z)$  в ряд Маклорена:  $F(z) = \sum f_n z^n$ . Тогда

$$F(\hat{G}) \stackrel{def}{=} \sum f_n (\hat{G})^n \quad (\text{здесь } f_n = (1/n!) d^n F/dz^n|_{z=0}). \quad (1.6)$$

Таким способом определяется и произвольная функция от оператора координаты или импульса. В частности, действие оператора  $\hat{p}^2$  сводится к двукратному последовательному действию оператора  $\hat{p}$ . Для эрмитовых операторов  $\hat{G}$  (см. ниже) другое определение функции от оператора (1.29) даёт тот же результат для функций  $F(g)$ , разложимых в ряд Маклорена, но оно применимо и тогда, когда такого разложения не существует, например для  $F(\hat{G}) = A\sqrt{\hat{G}}$  или  $F(\hat{G}) = e^{-1/\hat{G}^2}$ .

◇ В нижеследующих *примерах* приведены различные операторы в «естественном» для начального употребления координатном представлении (см. подробнее дальше) и найдены 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  $\psi_0(x)$  пропорциональна  $\delta(x - x_0)$ , а собственное значение  $x_0$  может быть любым действительным числом.

- *Оператор импульса* для движения по прямой

$$\hat{p}_x = -i\hbar d/dx. \quad (1.7a)$$

Собственные значения  $p_x$  и собственные функции  $\psi_p(x)$  находятся из уравнения  $\hat{p}_x\psi_p(x) \equiv -i\hbar d\psi_p(x)/dx = p_x\psi_p(x)$ . Отсюда следует, что собственные функции импульса<sup>1</sup> имеют вид плоских волн  $\psi_p(x) = e^{ipx/\hbar}$ , а собственное значение  $p$  может быть любым действительным числом. Обобщение на трёхмерный случай очевидно:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla : \quad \hat{p}_x = -i\hbar\partial/\partial x, \quad \hat{p}_y = -i\hbar\partial/\partial y, \quad \hat{p}_z = -i\hbar\partial/\partial z. \quad (1.7b)$$

- *Оператор энергии (гаммильтониан)*

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

Как мы увидим в гл. 2, этот оператор определяет эволюцию системы со временем  $\hat{H} = i\hbar d/dt$ . При внешнем сходстве с парой (оператор

---

<sup>1</sup>Эта волновая функция, как и упомянутая выше собственная функция оператора координаты, не принадлежит пространству квадратично интегрируемых функций  $L_2$ , в обоих случаях интеграл  $\int |\psi(x)|^2 dx$  не существует. Аккуратные определения включают небольшую «размазку» операторов (см. немного подробнее на стр. 30.) Если определять эти операторы на отрезке большой длины  $L$  и для  $\delta$ -функции использовать определение с помощью предельного перехода из функций, квадратично интегрируемых на этом отрезке, то естественным образом появляется нормировочный множитель  $\sqrt{2\pi/L}$  — ср. (B.4). Для собственных функций оператора импульса нередко используется «нормировка на поток», § 2.7.

импульса — координата) здесь есть существенное различие. Квантовомеханические средние значения определяются усреднением по **всем** координатам — **без** усреднения по времени — время в квантовой механике выступает просто как параметр.

- *Оператор момента импульса*

$$\hat{\mathbf{L}} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}]: \quad \hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x. \quad (1.9)$$

- *Оператор вероятности найти частицу вблизи точки  $\mathbf{x}_0$  в малом объёме  $dV$*

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

Вероятность найти частицу в объёме  $dV$  вблизи точки  $x_0$  есть

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

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

◇ Условие нормировки

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

означает просто, что в объёме есть одна, и только одна частица. Действительно, в соответствии с (1.4) среднее значение любой функции  $F(\mathbf{x})$  есть

$$\langle F(\mathbf{x}) \rangle = \int \psi^*(\mathbf{x})F(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})d\mathbf{x} \equiv \int F(\mathbf{x})|\psi(\mathbf{x})|^2d\mathbf{x}.$$

## § 1.5. Векторы состояний и волновые функции

Фурье-образ волновой функции  $\psi_a(x)$  — это её разложение по плоским волнам  $e^{ipx/\hbar}$  (1.1), описывающим состояния с определённым импульсом  $p$ :

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

При условии (1.11) имеем также  $\int |\tilde{\psi}_a(p)|^2 dp = 1$ . Плотность вероятности найти частицу с импульсом  $p$  есть  $d w(p)/dp = |\tilde{\psi}_a(p)|^2$ , и для произвольной  $F(p)$  среднее  $\langle F(p) \rangle = \int \tilde{\psi}_a^*(p) F(p) \psi_a(p) dp$ .

В каждой из функций  $\psi_a$  и  $\tilde{\psi}_a$  содержится полная информация о состоянии  $a$ , необходимо только сообщить, в каком базисе записана эта функция (в координатном или в фурье–импульсном). Это обстоятельство позволяет представить себе, что физическая реальность описывается некоторыми векторами функционального пространства состояний, для которого функции  $\psi_a$  и  $\tilde{\psi}_a$  подобны разным наборам координат при описании трёхмерного вектора его проекциями на разные оси при разных поворотах базового репера (П.А.М. Дирак).

Как и в нашем трёхмерном 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. Сопряжённый с ним вектор называют вектором бра (вместе они образуют слово *bracket*). (Это — аналоги 6-компонентного столбца  $F$  и 6-компонентной строки  $F^\dagger$  в электродинамике.) **Набор чисел, описывающих вектор состояния в избранном базисе, называют волновой функцией состояния** в этом базисе (представлении). **Сопряжённый 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  $|\mathbf{A}\rangle$  и  $\alpha|\mathbf{A}\rangle$ , где  $\alpha \neq 0$  — некоторое число, опре-

деляют одно и то же состояние. Ниже мы всегда имеем в виду нормированные векторы состояний  $|A\rangle$  и  $|B\rangle$ , в этом случае коэффициент  $\alpha$  сводится к фазовому множителю  $\alpha = e^{i\phi}$ , исчезающему при нормировке. В суперпозиции векторов состояний  $\alpha|A\rangle + \beta|B\rangle$  смысл имеет только отношение коэффициентов  $\beta/\alpha$ .

*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 нумеруют в порядке возрастания их энергии, начиная с нуля. Вектор  $n$ -го состояния часто обозначают  $|n\rangle$ .

• Все возможные векторы состояний *кет* образуют линейное гильбертово пространство состояний рассматриваемой системы (*оно же* — *пространство состояний*), а сопряжённые векторы *бра* — сопряжённое 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 что  $\langle f_i|f_j\rangle = \delta_{ij}$ . Этот набор  $|f_i\rangle$  можно использовать как **базис** векторного пространства. Далее буква  $f$  будет «значком» выбранного базиса  $\{|f_i\rangle\}$ , индекс  $i$  перечисляет векторы из этого базиса, фигурные скобки обозначают слово *совокупность*. В квантовой механике выбор базиса называют выбором представления, и надо научиться переходить от одного представления (базиса) к другому. Ранее обсуждались координатное и импульсное представления.

Следует заметить, что для разных физических систем пространства возможных состояний могут различаться. Простейший пример являются собой пространства состояний бесконечно глубоких ям разной ширины (ср. Приложение D).

◇ Большая часть нашего изложения описывает случай, когда движение частицы сосредоточено в конечной области пространства, набор собственных состояний дискретен, и нормировка (1.11) означает попросту условие, что частица находится где-то в этой области. Соответствующее гильбертово пространство (квадратично интегрируемых

функций) называют пространством  $L_2$ . В частности, это верно для системы, помещённой внутрь куба со стороной  $L$ . Для состояний частицы в этом объёме полный набор составляет совокупность плоских волн с волновыми числами  $k = \pi n/L$ , где  $n$  — целое число, возможные значения  $k$  образуют счётное множество.

Предельный переход  $L \rightarrow \infty$  превращает набор состояний в непрерывный. Этот набор можно задать с помощью плоских волн, волновые числа которых  $k$  пробегают уже непрерывный ряд значений. В этом случае мощность множества значений  $k$  — континуум. Если движение частицы инфинитно (например, описывается волновой функцией в виде плоской волны), состояние не нормируемо в обычном смысле, концепция обычного гильбертова пространства  $L_2$  прямо не работает. Для этого случая, следуя идеям Д. Гильберта, Г. Вейля и Е. Вигнера, И.М. Гельфанд и др. разработали концепцию *оснащённого гильбертова пространства*  $\mathcal{OL}$ , состояния которого сворачиваются с гладкими носителями, реализующими различные волновые пакеты<sup>1</sup>. С практической точки зрения это сводится к тому, что физические состояния реализуются не плоскими волнами, а их суперпозициями — волновыми пакетами, локализованными в конечной области пространства. Если иметь это в виду, всё излагаемое о гильбертовом пространстве годится и для пространства состояний оснащённого гильбертова пространства  $\mathcal{OL}$  с естественной заменой  $\delta_{ij}$  на  $\delta(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_j)$ , а сумм — на интегралы.

◇ Оператор, осуществляющий проектирование произвольного вектора состояния  $|a\rangle$  на состояние  $|f_i\rangle$ , (**проекторный оператор**  $\hat{\mathcal{P}}_i$  для состояния  $|f_i\rangle$ ) выделяет из  $|a\rangle$  составляющую, направленную вдоль  $|f_i\rangle$ :

$$\hat{\mathcal{P}}_i \stackrel{def}{=} |f_i\rangle\langle f_i| \quad (\text{без суммирования по значениям } i). \quad (1.14)$$

Отметим, что по определению

$$\left(\hat{\mathcal{P}}_i\right)^2 = \hat{\mathcal{P}}_i, \quad \left(1 - \hat{\mathcal{P}}_i\right)^2 = 1 - \hat{\mathcal{P}}_i. \quad (1.15)$$

<sup>1</sup>Формально та же картина имеет место при использовании *регуляризации*, состоящей в домножении базисных функций на множитель, не отличимый от 1 в интересующей нас области пространства и исчезающий на очень больших расстояниях, например,  $e^{-\varepsilon x^2}$ . Физическое описание отвечает пределу  $\varepsilon \rightarrow 0$ , регуляризация оправдана, если в этом пределе описание явлений не зависит от вида регуляризующей функции и величина  $\varepsilon$  выпадает из ответа.

«Нарезка» состояний непрерывного спектра на набор волновых пакетов используется ныне для численного решения задач рассеяния с высокой точностью.

Сумма проекционных операторов на все состояния  $i$  любого полного ортогонального базиса  $f$  в пространстве векторов состояния даёт единичный оператор:

$$\sum_i \hat{P}_i = \sum_i |f_i\rangle\langle f_i| = \hat{\mathbb{I}}. \quad (1.16)$$

*Элементарные примеры.*

(1) 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  $\hat{P}_1|\mathbf{a}\rangle = |\mathbf{e}_1\rangle\langle\mathbf{e}_1|\mathbf{a}\rangle = \mathbf{e}_1(\mathbf{e}_1\mathbf{a}) \equiv a_1|\mathbf{e}_1\rangle$ , т.е.  $\hat{P}_1$  действует как оператор проектирования на ось 1.

(2) Составляющие произвольного вектора  $\mathbf{A}$  в евклидовом пространстве, параллельные и перпендикулярные другому вектору  $\mathbf{B}$  можно записать в виде (нередко значок  $B$  в индексе не выписывается)

$$\mathbf{A}_{\parallel B} = \frac{(\mathbf{A} \mathbf{B})}{B^2} \mathbf{B}, \quad \mathbf{A}_{\perp B} \equiv \mathbf{A} - \mathbf{A}_{\parallel B} = \mathbf{A} - \frac{(\mathbf{A} \mathbf{B})}{B^2} \mathbf{B}. \quad (1.17)$$

### 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 трёхмерный вектор — его проекциями на координатные оси):

$$|\psi\rangle = \sum_i |f_i\rangle\langle f_i|\psi\rangle. \quad (1.18)$$

**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:

$$\{\psi(g)\} = \left\{ \sum_j \hat{U}_{ji}^{f \rightarrow g} \psi(f_j) \right\} \equiv \left\{ \sum_j \langle g_i | f_j \rangle \langle f_j | \psi \rangle \right\} = \{\langle g_i | \psi \rangle\}. \quad (1.19)$$

Набор чисел  $U_{ji}^{f \rightarrow g} \equiv \langle g_i | f_j \rangle$  определяет связь двух базисов (подобно матрицам преобразования систем координат в трёхмерном мире, строящимся из косинусов и синусов углов поворота осей). Эти числа образуют матрицу преобразования  $U^{f \rightarrow g}$  (матричное представление оператора преобразования  $\hat{U}^{f \rightarrow g}$ ).

◇ 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 ещё и *амплитудой вероятности*. В частности, пусть существует полная ортонормированная система собственных векторов  $|f_n^m\rangle$  оператора какой-нибудь физической величины  $M$  с собственными значениями  $m_n$  так, что  $\hat{M}|f_n^m\rangle = m_n|f_n^m\rangle$ . Разложим произвольный волновой вектор системы  $|\psi\rangle$  по этим собственным функциям:  $|\psi\rangle = \sum_n c_n |f_n^m\rangle$  (при этом  $c_n = \langle f_n^m | \psi \rangle$ ).

Тогда величина  $|c_n|^2$  есть вероятность найти систему в состоянии  $|f_n^m\rangle$ , т. е. наблюдать собственное значение  $m_n$  величины  $M$ .

#### Примеры.

◆ Волновая функция частицы с определённым 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 учётом  $\langle r | p \rangle = \langle p | r \rangle^*$  имеем

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

◆ **Бесконечно глубокая потенциальная яма с гамильтонианом**

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x), \quad U(x) = \begin{cases} \infty: & x \in (-\infty, 0), (b, \infty), \\ 0: & x \in (0, b). \end{cases} \quad (1.20)$$

Стационарные состояния этой задачи представляют собой стоячие волны, обращающиеся в нуль на границах отрезка  $[0, b]$ :

$$|n\rangle_i \equiv |n; (0, b)\rangle \rightarrow \psi_{n,i} = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{b}} \sin \frac{\pi n x}{b} & x \in [0, b], \\ 0 & x \in (-\infty, 0), (b, \infty), \end{cases}$$

$$E_n = \frac{(\pi \hbar n)^2}{2mb^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.21)$$

Набор этих состояний образует базис гильбертова пространства  $\mathcal{H}(0, b)$  квадратично интегрируемых функций, определённых на отрезке  $[0, b]$ , обращающихся в нуль на его границах и вне этих границ.

## § 1.6. Операторы. II. Квантование

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 рассматривают 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 даёт 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:

$$G_{ij}^f \stackrel{def}{=} \langle f_i | \hat{G} | f_j \rangle; \quad \hat{G} | f_i \rangle = \sum_j G_{ij}^f | f_j \rangle; \quad \hat{G} = \sum_{i,j} | f_i \rangle G_{ji}^f \langle f_j |. \quad (1.22)$$

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

В этом базисе волновой вектор некоторого состояния  $|\psi\rangle$  задаётся своей волновой функцией, её можно понимать как столбец  $\psi_i \equiv \psi(f_i)$

(а сопряжённую функцию — как строку  $\psi_j^* \equiv \psi^*(f_j)$ ). Действие оператора на волновую функцию описывается как равенство

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

◇ Чтобы найти матричное представление нашего оператора в другом базисе  $|g\rangle$ , повторим эту процедуру, и с учётом (1.19) получим

$$\hat{G} = \sum_{k,l} |g_l\rangle G_{kl}^g \langle g_k| \Rightarrow G_{kl}^g = \sum_{i,j} \langle g_l | f_i \rangle G_{ij}^f \langle f_j | g_k \rangle \equiv \sum_{i,j} U_{li}^{*f \rightarrow g} G_{ij}^f U_{jk}^{f \rightarrow g}. \quad (1.23)$$

Это соотношение можно трактовать также как закон преобразования формы оператора при преобразовании базиса (вращение, сдвиг, ...).

Появившиеся в (1.23) числа  $U_{ki}^{*f \rightarrow g}$  образуют матричное представление оператора преобразования  $(\hat{U}^{f \rightarrow g})^\dagger$ . Оно получается из матрицы  $\hat{U}^{f \rightarrow g}$  эрмитовым сопряжением (транспонированием и комплексным сопряжением). Если  $|g_k\rangle$  и  $|f_i\rangle$  — ортонормированные базисы, то изучаемые матрицы (и операторы) унитарны, т. е.

$$(\hat{U}^{f \rightarrow g})^\dagger \hat{U}^{f \rightarrow g} = \hat{1} \Rightarrow (\hat{U}^{f \rightarrow g})^\dagger = (\hat{U}^{f \rightarrow g})^{-1} \equiv \hat{U}^{g \rightarrow f}. \quad (1.24)$$

Мы не обсуждаем ниже неунитарные преобразования, искажающие нормировку.

#### Примеры.

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

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

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

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

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

∇ Аналогично, для оператора координаты  $\hat{r}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}$ ,  $\hat{r}(\mathbf{p}) = i\hbar\partial/\partial\mathbf{p}$ ,

т. е.

$$\langle \mathbf{r}' | \hat{r} | \mathbf{r} \rangle = \mathbf{r} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}); \quad \langle \mathbf{p}' | \hat{r} | \mathbf{p} \rangle = -i\hbar \partial[\delta(\mathbf{p}' - \mathbf{p})] / \partial\mathbf{p},$$

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

**Эрмитовы операторы.** Оператор  $\hat{B}$  называют эрмитово сопряжённым к оператору  $\hat{G}$ , если соотношение  $\int (\hat{B}\psi_1)^* \psi_2 dx = \int \psi_1^* \hat{G}\psi_2 dx$  справедливо для любых двух функций  $\psi_1$  и  $\psi_2$  ( $\hat{B} = \hat{G}^\dagger$ , в матричной записи оператор  $\hat{G}^\dagger$  получается из  $\hat{G}$  посредством транспонирования и комплексного сопряжения). Оператор называется эрмитовым (или самосопряжённым), если  $\hat{G} = \hat{G}^\dagger$ , т. е. если оператор совпадает со своим эрмитово сопряжённым<sup>1</sup>, или, в (1.22)  $G_{ji} = G_{ij}^*$ .

Среднее значение физической величины  $A$  по любому состоянию вещественно, т. е.  $\langle A \rangle = \int \psi^* \hat{A} \psi dx = \langle A \rangle^* = \int \psi^* \hat{A}^\dagger \psi dx$ . Поскольку  $\psi$  — произвольная функция, это означает, что  $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ , т. е.

$$\text{оператор физической величины эрмитов.} \quad (1.25)$$

Замечание. В аккуратное определение эрмитовости следует включить и указание на гильбертово пространство, на котором определён оператор. Обычно (по умолчанию) имеют в виду пространство квадратично интегрируемых функций  $L_2$  или соответствующее оснащённое гильбертово пространство. Так, для оператора импульса  $\hat{p} = -i\hbar d/dx$  эрмитовость означает, что

$$P_{12} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^*(x) \hat{p} \psi_2(x) = P_{21}^* \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_2^*(x) (+i\hbar d/dx) \psi_1(x).$$

Это равенство легко доказывается интегрированием по частям с учётом того, что подстановка  $-i\hbar \psi_1^*(x) \psi_2(x) |_{-\infty}^{\infty}$  обращается в ноль. Последнее справедливо для функций пространства  $L_2$ , для которых интегралы  $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_i(x)|^2$  — сходящиеся. Для оснащённого гильбертова пространства это соотношение сохраняется, если использовать регуляризацию, обсуждавшуюся в примечании на стр. 30. Если использовать, например, не принадлежащие  $L_2$  функции  $\psi_i = e^{-b_i x}$ , величины  $P_{12}$  и  $P_{21}$  не определены (интегралы расходятся), и уж тем более тождество  $P_{12} = P_{21}^*$  не имеет смысла.)

<sup>1</sup>Оператор  $\hat{G}$  называют антиэрмитовым, если  $G_{ji} = -G_{ij}^*$ .

Любой оператор  $\hat{F}$  можно выразить через пару эрмитовых операторов  $\text{Re } \hat{F}$  и  $\text{Im } \hat{F}$ , а именно  $\hat{F} = \text{Re } \hat{F} + i \text{Im } \hat{F}$ , где  $\text{Re } \hat{F} = (\hat{F} + \hat{F}^\dagger)/2$ ,  $\text{Im } \hat{F} = (\hat{F} - \hat{F}^\dagger)/(2i)$ . Говорят, что  $\text{Re } \hat{F}$  — эрмитова часть оператора  $\hat{F}$ , а  $i \text{Im } \hat{F}$  — его антиэрмитова часть.

**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. *Например,*

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

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

$$[\hat{p}, \hat{x}] \equiv \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = -i\hbar. \quad (1.26)$$

**Коммутатор  $i\hat{C}$  операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$**  определяется соотношением (его называют *перестановочным*)

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = i\hat{C}. \quad (1.27)$$

Если операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  эрмитовы, то эрмитов и оператор  $\hat{C}$ .

Если коммутатор пары операторов обращается в ноль, говорят, что они *перестановочны (коммутируют)*.

Простое использование определения даёт полезные соотношения

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}], \quad (1.28a)$$

$$[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C}] + [[\hat{B}, \hat{C}], \hat{A}] + [[\hat{C}, \hat{A}], \hat{B}] = 0 \text{ (тождество Якоби)}. \quad (1.28b)$$

• **Квантование.** Как уже говорилось выше, переход от классического к квантовому описанию этих систем — квантование — не может быть однозначным, поскольку в ответы можно, в принципе, добавлять поправки порядка  $\hbar$ , исчезающие в классическом пределе.

Обычно начинают с выбора обобщённых координат и импульсов  $P_i$  и  $Q_i$  со скобками Пуассона  $\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij}$ . Затем *определяют* операторы

$\hat{Q}_i, \hat{P}_j$  с перестановочными соотношениями  $[\hat{Q}_i, \hat{P}_j] = i\hbar\delta_{ij}$  (ср. (1.27))<sup>1</sup>. В этом выборе ограничиваются обычно прямоугольными координатами, нередко  $Q_i$  — обычные координаты.

После этого для остальных физически интересных величин используют те же комбинации координат и импульсов (теперь уже операторов), что и в классической механике. Эта процедура не вполне однозначна в силу некоммутативности координат и импульсов. Часто используют правило: *если классическая физическая величина известным образом определяется через координаты и импульсы, то оператор соответствующей квантовой величины определяется тем же соотношением со всеми возможными перестановками между  $\hat{x}$  и  $\hat{p}$* . Так, классической величине  $px$  сопоставляют обычно оператор  $(\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p})/2$ . Вообще говоря, нельзя и исключить добавление в квантовое определение величины, пропорциональной  $\hbar$  и исчезающей в классическом пределе. Можно говорить, что именно так вводится оператор спина — составная часть полного момента импульса квантовой частицы.

• **Подробнее о собственных значениях и собственных векторах.** Собственные значения  $\lambda$  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  $\psi_\mu^*$  слева, а  $(\hat{A} \psi_\mu)^* = \mu \psi_\mu^*$  на  $\psi_\lambda$  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 оператора какой-нибудь физической величины  $\hat{\lambda}$  соответствует несколько независимых собственных функций (состояний), то говорят, что эти состояния **вырождены** по  $\lambda$ . Число линейно независимых собственных функций, отвечающих этому значению  $\lambda$  называют **кратностью вырождения**. В квантовой механике понятие *вырождение* без указания оператора  $\hat{\lambda}$  означает обычно вырождение по энергии.

*Набор собственных функций  $\psi_n(x)$  эрмитова оператора  $\hat{\lambda}$  полон* (в пространстве, на котором определён наш оператор), т. е. из этого набора можно составить ортонормированный базис гильбертова про-

<sup>1</sup> Вообще, если скобка Пуассона двух физических величин есть  $\{A, B\} = D$ , то их операторы строят так, чтобы их коммутатор  $[\hat{A}, \hat{B}]$  равнялся  $i\hbar\hat{D}$ .

странства (в случае вырождения можно *выбрать* собственные функции ортогональными)<sup>1</sup>:

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}, \quad F(x) = \sum_n a_n \psi_n(x); \quad a_n = \int \psi_n^*(x') F(x') dx';$$

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

Так, собственные функции оператора импульса  $e^{ipx/\hbar}$  образуют полный набор, составляющий базис преобразования Фурье. Каждой собственной функции отвечает новое собственное значение импульса  $p$ .

Собственные функции оператора пространственного отражения § 2.3 — это чётные и нечётные при отражениях функции. Всем чётным функциям отвечает одно и то же значение чётности  $\mathcal{P} = 1$ , всем нечётным функциям отвечает другое, но опять одно и то же значение чётности  $\mathcal{P} = -1$ .

◇ Пусть система собственных функций эрмитова оператора  $\hat{G}$  и его собственных значений определяется соотношениями  $\hat{G}\psi_n = G_n\psi_n$ . Чтобы определить действие оператора  $F(\hat{G})$  на произвольную волновую функцию, запишем разложение этой волновой функции по собственным функциям оператора  $\hat{G}$ :  $\psi = \sum_n a_n \psi_n$ . Тогда новое определение *функции от оператора*, эквивалентное (1.6) для функций  $F(g)$ , разложимых в ряд Маклорена, и применимое также для функций, не имеющих такого разложения, имеет вид

$$F(\hat{G})\psi \stackrel{\text{def}}{=} \sum_n a_n F(G_n) \psi_n. \quad (1.29)$$

### § 1.7. 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.  $\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$ ,  $\hat{B}|\psi_n\rangle = b_n|\psi_n\rangle$ .

<sup>1</sup>Здесь не выписаны индексы, напоминающие об операторе  $\hat{\lambda}$ .

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

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

Получилось, что  $(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle = 0$  для произвольного вектора  $|\psi\rangle$ , т. е.  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ .

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 доказать. 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 определённые значения, никакая другая величина (не являющаяся их функцией) не может иметь определённого 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 [1, 2].*

## § 1.8. Оператор конечного сдвига, оператор импульса

Покажем теперь на примере, как получаются выражения для операторов некоторых физических величин, помимо обращения к скоб-

кам Пуассона. Для этого мы рассмотрим достаточно гладкую функцию  $f(x)$  и определим оператор  $\hat{U}_a$  сдвига координат на величину  $a$  соотношением<sup>1</sup>

$$\hat{U}_a f(x) = f(x + a). \quad (1.30)$$

Разложим сдвинутую функцию в ряд Тейлора:

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

В выписанном ряде нетрудно увидеть форму  $\exp(a d/dx) f(x)$ . Это значит, что можно записать **оператор конечного сдвига**

$$\hat{U}_a = e^{a(d/dx)}. \quad (1.31a)$$

• Если система обладает трансляционной инвариантностью, т. е. её свойства не меняются при сдвиге, импульс системы сохраняется (частный случай *теоремы Нётер*). И наоборот, импульс определяется как величина, которая сохраняется в силу трансляционной инвариантности. Эта инвариантность включает в себя и инвариантность относительно конечного сдвига (см. § 1.8). 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 даёт:  $A = -A^*$ . 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 (1.31a)

$$\hat{U}_a = e^{ia\hat{p}/\hbar}. \quad (1.31b)$$

<sup>1</sup>Это — пример реализации общего оператора преобразования  $\hat{U}^{f \rightarrow g}$  (1.23).

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?

## § 1.9. Соотношение неопределённости

Обсудим сначала некоторые факты из теории преобразований Фурье, изучавшейся в курсе функционального анализа. Там рассматривались функция  $f(x)$ , определённая в «координатном»  $x$ -пространстве, и её Фурье-образ  $\tilde{f}(k)$ , определённый 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

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

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

Произведение среднеквадратичных отклонений  $\Delta x \Delta k$  ограничено снизу неравенством  $\Delta x \Delta k \geq 1/2$ , в физике его называют соотношением неопределённости.

Подобные неравенства в электродинамике и акустике выглядят как соотношения неопределённостей (*координата — волновой вектор*) и (*время — частота*). В современных курсах электромагнетизма обсуждаются эти соотношения и их физический смысл; использование этих соотношений позволяет выполнить важные оценки. Большинство полученных при этом выводов с очевидным изменением терминологии переносится и на квантовую механику, что и делается ниже.

• Рассмотрим пару эрмитовых операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  с коммутатором  $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$  и для произвольного состояния  $|n\rangle$  изучим средние значения  $\langle A \rangle \equiv \langle n|\hat{A}|n\rangle$ ,  $\langle B \rangle \equiv \langle n|\hat{B}|n\rangle$  и среднеквадратичные отклонения величины  $A$  и  $B$  от их средних значений (*дисперсии*)  $\Delta A = \sqrt{\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle}$ ,  $\Delta B = \sqrt{\langle (\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle)^2 \rangle}$ .

Определим также операторы  $\hat{A}_1 = \hat{A} - \langle A \rangle$  и  $\hat{B}_1 = \hat{B} - \langle B \rangle$ . Легко проверить, что  $[\hat{A}_1, \hat{B}_1] = i\hat{C}$  и  $\langle \hat{A}_1^2 \rangle = \Delta A^2$ ,  $\langle \hat{B}_1^2 \rangle = \Delta B^2$ . Образует 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 квадратичная форма  $J(\alpha)$  неотрицательна при всех  $\alpha$ . Это может иметь место только если дискриминант этой формы не положителен, т. е. должно быть  $4(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \langle C \rangle^2$ . Итак, имеет место **соотношение неопределённостей**:

$$[A, B] = iC \Rightarrow \boxed{\Delta A \cdot \Delta B \geq |\langle C \rangle|/2}. \quad (1.32)$$

В частности,

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2. \quad (1.33)$$

◇ Соотношению неопределённостей можно дать ещё 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 среднеквадратичные отклонения) взаимосвязаны. Эта связь и даётся соотношением неопределённости. Иными словами, в квантовой теории соотношения неопределённости являются следствием того, что физические величины описываются операторами, и эти операторы, вообще говоря, не коммутируют.

◇ Соотношение неопределённости означает, что локализация частицы в малой области пространства требует физических условий, неблагоприятных для измерения её импульса, и наоборот, условия, необходимые для точного измерения импульса, исключают возможность локализации частицы в небольшой области пространства. Вообще, в состоянии, где разброс значений величины  $A$  составляет  $\Delta A$ , разброс  $\Delta B$  значений величины  $B$  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 неопределённости*, внутри которой движется частица (расплывающийся волновой пакет)<sup>1</sup>. К примеру, невозможно одновременно измерить импульс и координату с высокой точностью, и соотношение неопределённости ограничивает снизу совокупную погрешность этих измерений. Если приготовлено состояние, в котором частица локализована в небольшой области обычного пространства, то она быстро делокализуется за счёт разброса в импульсах. например, если свободный электрон локализовать в объёме радиуса  $10^{-8}$  см, то через секунду он почти равновероятно может быть найден в области радиусом 1500 км (а неопределённость положения макроскопического объекта — шарика с диаметром 1 см и массой 1 г — увеличится на 1% за миллиарды лет).

• Основой построения квантовой механики послужила нам волновая картина, в которой зависимость волновой функции от времени описывается хорошо знакомым множителем  $e^{-i\omega t} \equiv e^{-iEt/\hbar}$ . Это описание распространяется на общий случай в гл. 2, где показано, что оператор энергии (гамильтониан)  $\hat{H}$  (1.8) определяет эволюцию системы во времени так, что оператор энергии соотносится со временем так же, как и оператор импульса с координатой. Естественно поставить вопрос о существовании соответствующего соотношения неопределённости. Чтобы сделать это, следует в дополнение к изучавшимся усреднениям по пространству (1.4) рассмотреть ещё и усреднение по времени. В соот-

<sup>1</sup>Доказательство — в обсуждении соотношения (3.9).

ветствии с общим подходом, это усреднение следует сначала выполнять на конечном интервале времени, например, от 0 до  $T$ , а уж затем переходить к пределу  $T \rightarrow \infty$ . Именно так определяется неопределённость интервала времени  $\Delta t$  и получается *соотношение неопределённостей энергия–время* того же точно вида, что и в электродинамике:

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \hbar/2. \quad (1.34)$$

Это соотношение означает, в частности, что при измерении, длящемся время  $t$ , *невозможно измерить* энергию с точностью, лучшей чем  $\hbar/(2t)$ . 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  $\omega$ , 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. пример в разд. 16.6.2, стр. 363)<sup>1</sup>. Это существенно для явлений микромира, но для явлений окружающей нас жизни характерная величина нарушений чудовищно мала. Так, при наблюдении в течение 0,001 секунды отклонения от закона сохранения энергии составляют  $\sim 10^{-31}$  Дж. В большинстве случаев такая неопределённость «тонет» в погрешности описания изолированной системы, доставляемой пренебрегаемым взаимодействием с окружением.

Для нестабильной частицы со временем жизни  $\tau$  (для неё вероятность  $|\psi|^2 \propto e^{-t/\tau}$ ) соотношение неопределённостей (1.34) означает, что энергию этой частицы невозможно определить с точностью, лучшей  $\hbar/2\tau$ , эта величина определяет *ширину* соответствующего уровня энергии (см. подробнее в разд. 2.8 и 16.6.2).

• **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  $\Delta x$  достигается при  $\Delta x \equiv x_0 = \sqrt{\hbar/2m\omega}$ , что даёт точную нижнюю границу  $E \geq \hbar\omega/2$ .

<sup>1</sup>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.

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

$$\begin{aligned} E = \langle \hat{H} \rangle &\geq \Delta p^2/(2m) - \langle e^2/r \rangle \gtrsim \Delta p^2/(2m) - e^2 \langle 1/\Delta r \rangle \gtrsim \\ &\gtrsim \hbar^2/(8m\Delta r^2) - e^2/\langle \Delta r \rangle \geq -me^4/2\hbar^2 = -13,6 \text{ эВ}. \end{aligned}$$

Здесь по аналогии с тем, что имеет место для компонент векторов, мы использовали справедливое только по порядку величины соотношение неопределённости для длин векторов  $\Delta r \Delta p \gtrsim \hbar$  и считали, что  $\langle 1/r \rangle \approx 1/\Delta r$ , получив  $\Delta r \approx \hbar^2/me^2$ .

### Чему мы уже научились

Напомним некоторые вопросы, не имеющие ответов в классической физике.

1. В классической физике ничто не мешает электрону приблизиться сколь угодно близко к ядру или вращаться на сколь угодно большом расстоянии от него. Соответственно, размеры атомов и энергии их ионизации (энергия, которую надо сообщить атому, чтобы вырвать из него электрон) могут меняться от атома к атому. Не существует классических причин, почему в действительности все атомы и молекулы имеют некоторые, не очень большие размеры. Более того, все атомы одного сорта имеют одинаковые размеры. Одинаковы и энергии их ионизации. То же относится и ко всем молекулам одного сорта.

2. Согласно теореме Ирншоу, система заряженных частиц (например, электронов и ядер) не может быть стабильной. Устойчивым является состояние, когда либо все заряды противоположного знака свалились друг на друга, образовав нейтральные объекты, либо все заряды разбегаются на предельно большие расстояния друг от друга. Если этот вывод работает, наш мир, составленный из атомов (ядер и электронов) и молекул, не может существовать.

3. Электрон, вращающийся вокруг ядра, должен излучать и, быстро теряя энергию, падать на ядро. Этого не происходит.

Рассмотренные примеры применения соотношения неопределённости показывают, что квантовая теория даёт ответы на эти вопросы.

А. Энергия атомной системы, описываемой каким-нибудь гамильтонианом, не может быть меньше некоторого значения. Состояние системы с наименьшей возможной энергией называют *основным состоянием*. Разумеется, это состояние абсолютно стабильно. Ни о каком

падении на центр или «слипании» зарядов противоположного знака в этом состоянии не может быть и речи.

Б. Размер атомной системы не может быть произвольно малым. Его значение по порядку величины ограничивается соотношением неопределённостей.

Соотношения неопределённостей послужили *Н. Бору* базой для формулирования общей **концепции дополнительности**, реализующейся в Природе.

*В Природе существуют пары дополняющих друг друга понятий, (объектов) одновременная полная реализация которых невозможна.*

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

*Концепция дополнительности 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 предыстории.)

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.

## § 1.10. Измерение в квантовой механике

Измерения в квантовой механике подразделяются на две большие группы.

**I.** Измерение — это процесс взаимодействия между *квантовым объектом* и *классическим объектом (прибором)*, происходящий независимо от наблюдателя (*Н. Бор*)<sup>1</sup>. Только такие измерения и были предметом обсуждения долгие годы после создания квантовой теории.

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

II. В последние десятилетия был реализован новый класс измерений, в которых и прибор является квантовым объектом.

Обсудим сначала измерения первой группы.

I. В классической постановке предметом исследования является детальное описание исследуемой системы. При этом 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). 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  $\Delta x$  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.

◇ После измерения физической величины  $A$  в состоянии  $|\Psi\rangle$  система переходит в другое состояние  $|\psi_{A_i}\rangle$ , которое задаётся прибором, но обычно не является даже собственным вектором оператора  $\hat{A}$ . Можно предсказать лишь вероятность того, при этом обнаружатся значение  $A_i$  и состояние  $|\psi_{A_i}\rangle$ . 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 ве-

личины  $A$  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 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 приближённо, наименьшая погрешность в этом понятии задаётся соотношением неопределённостей, см. более детально на стр. 102.

*«Частица не имеет в действительности ни определённого импульса, ни определённого положения в пространстве; описание с помощью  $\psi$ -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.

◆ В некоторых случаях удаётся приготовить начальное состояние так, что 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 её повторное измерение в состоянии  $|a\rangle$  оставит систему в том же состоянии и даст опять то же значение. Классическим примером такого сорта является наблюдение циркулярно поляризованного света. На квантовом языке можно сказать, что лево поляризованный свет состоит из набора фотонов, момент импульса которых ориентирован вдоль направления движения света, а для право поляризованного света момент импульса фотонов направлен в противоположном направлении. Измерение поляризации не меняет знака циркулярной поляризации.

**II.** Вторая группа измерений возникла в связи с появлением возможности наблюдать квантовые явления с помощью квантовых же

приборов. Здесь предметом измерения является индивидуальное квантовое состояние объекта или переход между двумя таким состояниями. При этом исследуемая система проходит через ряд квантовых состояний, которые можно однозначно идентифицировать, и классический прибор не используется. Если некоторые свойства измеряемого объекта известны, то можно определённо сказать, например, что под воздействием света определённой длины волны именно этот атом перешёл в другое, известное состояние. Таким способом можно создавать, например, одноатомные ячейки памяти. Квантовомеханическая неоднозначность состоит в том, что мы не можем гарантировать поглощение именно этого фотона, а только определяем вероятность этого процесса.

Сюда примыкают и ситуации, когда для ответа не нужны детальные сведения о системе. Простым примером такого рода является задача о радиоактивном распаде частицы А, если нас интересует только вопрос, может ли появиться среди продуктов распада частица В. Ответ на этот вопрос несомненно однозначен (а вот определение вероятности этого распада и распределение по углам вылета и т.п. — задачи, относящиеся к первой группе измерений).

### § 1.11. Матрица плотности

Понятие волновой функции определяется только для изолированной системы, состояние с определённой волновой функцией называют *чистым*. 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  $G$ , определённую для нашей системы (т. е. определяемую оператором  $\hat{G}$ , зависящим только от переменных  $x$ ). Действие этого оператора на состояние полной системы можно описать соотношением  $\hat{G}\psi(x, X) = \int G(x, x')\psi(x', X)dx'$ . Здесь  $G(x, x')$  — просто матричное представление оператора  $\hat{G}$ . Среднее значение физической величины  $G$ , усреднённое по состояниям полной системы, есть

$$\begin{aligned} \langle G \rangle &= \left\langle \int \psi^*(x, X)\hat{G}\psi(x, X) \prod dx dX \right\rangle \equiv \\ &\equiv \left\langle \int \psi^*(x, X)G(x, x')\psi(x', X) \prod dx dx' dX \right\rangle. \end{aligned} \quad (1.35)$$

(Угловые скобки здесь описывают возможное усреднение по ансамблю состояний «большой» системы, например в термостате.)

В условиях «стационарности» среды (*надо ещё договориться, что значит это условие*) интегрирование по переменным  $X$  и усреднение по состояниям «большой» системы одинаковы для всех операторов, действующих только на переменные  $x$ , что приводит нас к понятию **матрицы плотности** (Л. Д. Ландау, Дж. фон Нейман):

$$\rho(x', x) = \left\langle \int \psi(x, X) \psi^*(x', X) dX \right\rangle. \quad (1.36)$$

С её помощью среднее значение нашей физической величины  $G$  записывается в виде

$$\langle G \rangle = \int G(x, x') \rho(x', x) dx dx'. \quad (1.37)$$

Описание с помощью волновой функции — частный случай этого описания, в котором  $\rho(x, x') = \psi^*(x') \psi(x)$ .

Описание с помощью матрицы плотности может не оказаться полезным, если свойства большой системы меняются очень быстро (например, под воздействием быстро меняющихся полей).

• При изучении задач рассеяния в некоторых случаях оказывается важным, что состояния сталкивающихся частиц недостаточно рассматривать как простые плоские волны с точно определённым импульсом  $|k\rangle$ . Простой пример доставляет нам описание пучка частиц в ускорителе. Обычно говорят, что частицы внутри пучка (т. е. в известной ограниченной области пространства — области локализации) имеют импульс  $p$ . Мы обозначаем такое состояние, добавляя знак тильда сверху,  $|\widetilde{p}\rangle$ . Это значит, что каждую из частиц следует описывать в виде волнового пакета вида

$$|\widetilde{p}\rangle = \int_k a(k) e^{-i[\omega(k)t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}]} dk \equiv \int_k a(k) |k\rangle dk$$

с весовой функцией  $a(k)$ , имеющей максимум при  $k = p$  и с разбросом импульсов, по порядку величины определяемом соотношением неопределённостей с размерами области локализации. Как правило, более детальные свойства пакета не известны. На первый взгляд, чтобы вычислить какие-нибудь физические величины следует фиксировать (придумать) детальные свойства весовой функции  $a(k)$ , а затем — чтобы

получить натуральный квантовомеханический результат, усреднить ответ по ансамблю возможных реализаций волнового пакета.

Оказывается полезным изменить порядок действий. Рассмотрим наблюдаемое значение физической величины  $A$ :

$$\langle \widetilde{p} | \hat{A} | \widetilde{p} \rangle \equiv \int_{k, k'} dk dk' a^*(k') a(k) \langle k' | \hat{A} | k \rangle.$$

В этом соотношении величина  $\langle k' | \hat{A} | k \rangle$  более или менее легко вычисляется по правилам квантовой механики, а «пакетный вклад»  $a^*(k') a(k)$  зависит от деталей реализации пакета. Однако физический интерес представляет лишь среднее по ансамблю

$$\langle A \rangle_{ans} \equiv \langle (\langle \widetilde{p} | \hat{A} | \widetilde{p} \rangle) \rangle_{ans} = \int_{k, k'} dk dk' \rho(k', k) \langle k' | \hat{A} | k \rangle, \quad (1.38)$$

$$\rho(k', k) = \langle a^*(k') a(k) \rangle_{ans}.$$

Появившаяся здесь величина  $\rho(k', k)$  есть *матрица плотности пучка*, записанная в импульсном представлении с практически теми же свойствами, что и обсуждавшаяся выше (1.37). В её описании несущественные детали устройства волновых пакетов исчезают. Использование этой матрицы плотности особенно полезно в тех задачах, где величина  $\langle k' | \hat{A} | k \rangle$  очень быстро меняется при изменении  $k$  и  $k'$ .

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

$$\tilde{\rho}(\tilde{x}, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N/2}} \int \prod_{i=1}^N e^{-i \sum p_i u_i} \hat{\rho}(x, x') du_i, \quad (u_i = x_i - x'_i). \quad (1.39)$$

Получившуюся матрицу плотности в смешанном  $(x, p)$  представлении называют *функцией Вигнера*. В квазиклассическом случае (гл. 6) она переходит в функцию распределения в фазовом пространстве  $(x, p)$ .

• Использование матрицы плотности оказалось 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 (1.35) 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 (1.36).

**Статистический оператор  $\hat{\rho}$**  связан с матрицей плотности так же, как матричная форма любого оператора  $G(x, x')$  связана с его операторной формой  $\hat{G}$  (1.22). С помощью этого оператора среднее значение физической величины  $G$  записывается в виде суммы по всем возможным состояниям системы  $\text{Tr}$ :

$$\langle G \rangle = \int G(x, x') \rho(x', x) dx dx' \equiv \frac{1}{Z} \text{Tr}(\hat{G} \hat{\rho}), \quad Z = \text{Tr}(\{\hat{\rho}\}). \quad (1.40)$$

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.

## § 1.12. Задачи

1. Найти  $\psi(x, t)$  для пакета, который в начальный момент имел форму

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{1/4} \sqrt{a}} \exp\left(-\frac{x^2}{4a^2} + ik_0 x\right) \quad (1.41)$$

для частиц с законами дисперсии  $\omega = ck$  и  $\omega = \hbar k^2/2m$ . Найти средние значения координаты и импульса. Вычислить размеры пакетов при  $t = 1$  с для электрона, первоначально локализованного в области  $a = 0,5 \cdot 10^{-8}$  см (атом водорода), и для шарика от пинг-понга ( $a = 2$  см,  $m = 5$  г). Получить оценку этих размеров с помощью соотношения неопределённостей.

2. Для частицы в бесконечно глубоком прямоугольном потенциальном ящике (1.20)

- показать, что уровни энергии  $E_n$  и волновые функции  $\psi_n$  описываются соотношениями (1.21);
- найти энергию основного состояния  $E_1$  и номер состояния  $n$  с энергией  $E_n \approx kT$ , где  $T=300$  К, оценить  $(E_{n+1} - E_n)/E_n$  для этой энергии для частиц разных масс в ящике размера  $a$ :

а)  $m=1$  г,  $a \sim 1$  см, б) электрон,  $a \sim 10^{-8}$  см (атом), в) атом He,  $a \sim 1$  см.

- На каком по счёту уровне находится абсолютно упругий шарик с массой 1 г, подпрыгивающий над стальной плитой на высоте 1 м. Приняв (по Вашему выбору) «разумные» ограничения погрешностей измерения, оцените число уровней, отвечающих возможному наблюдению.
- сравнить классическую плотность вероятности  $dw/dx = 2/(v(x)T)$  с квантовой  $dw/dx = |\psi_n(x)|^2$  при  $n=1$  и  $n \gg 1$ ; сделать то же для  $dw/dp$ ;
- найти вероятность пребывания частицы в области  $0 < x < a/3$ ;
- найти силу давления частицы на стенку;
- найти работу, необходимую для медленного сжатия ямы в  $\nu$  раз.

3. Для двумерного потенциального ящика

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

- найти уровни энергии  $E_n$  и волновые функции  $\psi_n$ ;
  - отдельно рассмотреть случай квадратного ящика.
4. Найти плотность числа состояний для трёхмерной (кубической), двумерной (квадратной) и одномерной ям со стороной  $a$ , с непроницаемыми стенками 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. Оценить с помощью соотношения неопределённостей энергию основного состояния и неопределённость в положении по вертикали нейтрона в гравитационном поле Земли в этом состоянии. (Получить числа.)
7. Найти распределение по импульсам в основном состоянии атома водорода  $\psi(r) = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/(2a)}$ .
8. Пусть  $U(x)$  — потенциальная энергия системы, а  $\hat{T} = \hat{p}^2/(2m)$  — кинетическая. Найти соотношения неопределённостей для  $\Delta x$  и  $\Delta T$ , для  $\Delta T$  и  $\Delta U(x)$ .
9. Найти коммутаторы  $[p_x, x]$ ,  $[p_x, z]$ .
10. Найти оператор  $1/r$  в импульсном представлении (трёхмерный случай).
11. Показать, что  $[e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}] = \mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ . Найти  $[e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}^2]$ .

12. Нетрудно проверить, что  $\hat{p}_x e^{-ax} = i\hbar a e^{-ax}$ , т. е.  $e^{-ax}$  — собственная функция оператора импульса с чисто мнимым собственным значением. Как это согласовать с рассуждениями, из которых получилось утверждение (1.25)?
13. Покажите, что для произвольного оператора  $\hat{A}$  среднее по любому состоянию  $\langle \psi | \hat{A} \hat{A}^\dagger | \psi \rangle$  положительно.
14. Покажите, что для компонент оператора момента импульса (1.9) и векторов  $A_i = r_i, p_i$  имеют место перестановочные соотношения  $[L_i, A_j] = i\hbar e_{ijk} A_k$  (здесь  $e_{ijk}$  — тензор Леви-Чивита).

## Глава 2

# Состояния и их эволюция

### § 2.1. Уравнение Шредингера

Среди основных положений квантовой механики (§ 1.3) — утверждение, что волновая функция даёт 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 оператор  $\hat{D}$ , используем принцип соответствия и вспомним выражение для плоской волны (1.1),  $\psi = Ce^{i(px-Et)/\hbar}$ . Для такой функции дифференцирование по времени даёт 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)<sup>1</sup> (1.8). В сущности, утверждение, что  $\hat{D} = -i\hat{H}/\hbar$ , представляет ещё один постулат квантовой механики, но постулат «второго сорта», как и все получаемые из принципа соответствия определения операторов физических величин. Итогом этих рассуждений является **уравнение для зависимости волновой функции от времени**<sup>2</sup> — **уравнение Шредингера**:

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t)} \Rightarrow \boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle}; \quad (2.1)$$
$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}, t).$$

<sup>1</sup>В классической механике  $p = \partial S/\partial x$ ,  $H = -\partial S/\partial t$  ( $S$  — действие). Квантование отвечает замене  $p \Rightarrow -i\hbar\partial/\partial x = \hat{p}$ . По аналогии, подобное соответствие строится и для энергии,  $E \Rightarrow i\hbar\partial/\partial t \rightarrow \hat{H}$ .

<sup>2</sup>Этот вывод не может зависеть от выбора представления волновой функции, что отвечает записи в виде уравнения на вектор состояния — вторая форма (2.1). Гамильтониан движения в магнитном поле имеет немного иной вид (11.7).

Его основные свойства:

- 1) 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);
- 2) 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 вплоть до гл. 16 мы ограничиваемся случаем, когда гамильтониан  $\hat{H}$  не зависит от времени явно. В этой части основным предметом нашего изучения будут стационарные состояния, спектр их энергий и волновые функции.*

• 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  $\phi_n(t) = -E_n t/\hbar$ ,  $\hat{H}\psi_n(\mathbf{r}) = E_n\psi_n(\mathbf{r})$ . Величина  $E_n$  появилась как параметр разделения переменных, не зависящий от  $\mathbf{r}$  и  $t$ . Принцип соответствия делает естественным отождествление этой величины с энергией системы в состоянии  $\psi_n$ . 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*.

◇ Если одно собственное значение  $E$  отвечает нескольким линейно независимым волновым функциям  $\psi_\alpha$ , 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 этих функций также описывает стационарное состояние с той же энергией  $E$ . При описании

системы с вырождением любой из таких наборов функций  $\psi_\alpha$  можно рассматривать как базис.

◇ В литературе встречается термин *нелинейное уравнение Шредингера*. Обычно такое уравнение получается из линейного уравнения для системы большого числа частиц после усреднения по состояниям частиц, не обсуждающихся в изучаемой задаче. В релятивистской теории подобное уравнение возникает и в отсутствие других частиц.

### 2.1.1. 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  $\hat{H}$ :  $\psi(\mathbf{r}, 0) = \sum c_n \psi_n(\mathbf{r})$ , полагая (для сокращения выкладок) эти функции нормированными. Со временем каждая из этих функций эволюционирует по своему закону (2.2), и в итоге мы имеем

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

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

(ii) 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, то  $\hat{U} = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)$ .

(iii) Обсуждавшееся в § 1.1 распыление волнового пакета можно рассматривать как иллюстрацию общего правила эволюции состояния со временем (2.3) для движения в вакууме частицы с известной зависимостью энергии от импульса.

(iv) Обычно для описания волновых функций наблюдаемых объектов хорошо работает приближение, в котором эта волновая функция описывает какое-то стационарное состояние. Но иногда для описания наблюдаемой ситуации такого приближения недостаточно, и для описания явлений следует использовать волновые пакеты — суперпозиции стационарных состояний. К счастью, часто можно разделить процесс образования пакета, задающий его форму, и его распространение, во

многих случаях оказывающееся движением в пустом пространстве. Типичная ситуация отвечает распространению пакета, близкого к монохроматической волне, но имеющего некоторый разброс волновых чисел и соответственно локализованного в некоторой области пространства. Характерный продольный размер пакета по аналогии с оптикой нередко называют длиной когерентности.

### 2.1.2. Плотность тока вероятности

Рассмотрим плотность вероятности  $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$  и её изменение со временем,  $\partial\rho/\partial t = \psi^*\partial\psi/\partial t + (\partial\psi^*/\partial t)\psi$ . Подставим в последнее равенство вместо производных от  $\psi$  и  $\psi^*$  их выражения, получающиеся из уравнения Шредингера (2.1). В итоге найдем

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

Добавляя и вычитая в  $Z$  выражение  $\nabla\psi^*\nabla\psi$ , запишем

$$Z \equiv \psi^*\nabla^2\psi + \nabla\psi^*\nabla\psi - \nabla\psi^*\nabla\psi - (\nabla^2\psi^*)\psi = \nabla[\psi^*(\nabla\psi) - (\nabla\psi^*)\psi].$$

Итак, правая часть уравнения для  $d\rho/dt$  оказалась дивергенцией некоторого вектора, и это уравнение можно переписать в виде уравнения непрерывности:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = -\nabla\mathbf{j}, \quad \mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m}[\psi^*(\nabla\psi) - (\nabla\psi^*)\psi]. \quad (2.4)$$

Таким образом, наша интерпретация квадрата модуля волновой функции как плотности вероятности внутренне согласована и последовательна. Вектор  $\mathbf{j}$  называют *вектором плотности тока вероятности*.

Выделяя амплитуду и фазу волновой функции, имеем

$$\psi = \sqrt{\rho}e^{i\varphi} \Rightarrow \mathbf{j} = \hbar\rho\nabla\varphi/m. \quad (2.5)$$

Итак, вектор  $\mathbf{j}$  направлен вдоль градиента фазы волновой функции. Именно в этом находят физический смысл фазы.

◇ В частности, для плоской волны (1.1)

$$\psi(\mathbf{x}) = Ae^{i(\mathbf{p}\mathbf{x} - Et)/\hbar} \Rightarrow \mathbf{j} = |A|^2 \frac{\mathbf{p}}{m} \equiv |A|^2 \mathbf{v} \quad (2.6a)$$

( $\mathbf{v}$  — 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  $\mathbf{p}$* ):

$$\psi(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{m}{p}} e^{i(\mathbf{p}\mathbf{x} - Et)/\hbar}. \quad (2.6b)$$

### 2.1.3. 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 учётом (1.28a) и соотношений  $\hat{H} = T + U(r)$ ,  $T = \hat{\mathbf{p}}^2/2m$  получаем

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

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

$$2\langle n | T | n \rangle = \langle n | \mathbf{r} \nabla U | n \rangle. \quad (2.7)$$

◇ В частности, если потенциал — однородная функция координат степени  $k$ , т. е.  $U = A|\mathbf{r}|^k$ , то  $2\langle n | T | n \rangle = k\langle n | U | n \rangle$ . В важных случаях (i)  $k = 2$  (гармонический осциллятор) получаем  $\langle T \rangle = \langle U \rangle = E_n/2$ .

((ii)  $k = -1$  (атом водорода) получаем  $\langle T \rangle = -\frac{\langle U \rangle}{2} = -E_n$ .

## § 2.2. Сохраняющиеся величины. Симметрия и вырождение стационарных состояний

Пусть  $A$  — оператор какой-нибудь физической величины. Рассмотрим её среднее значение  $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$  по некоторому состоянию  $|\psi\rangle$ , и вычислим производную по времени от этого среднего значения:

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

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

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

Отсюда следует, что если оператор физической величины  $\hat{A}$

- 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 зависит от времени,

$$\boxed{\begin{array}{c} \underbrace{\partial \hat{A}/\partial t = 0, \quad [\hat{A}, \hat{H}] = 0}_{\Downarrow} \\ \hat{A} \text{ — оператор сохраняющейся величины.} \end{array}} \quad (2.8)$$

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 гамильтониана. (Разумеется, интересен только случай, когда  $\hat{A}$  не сводится к какой-нибудь функции гамильтониана.)

В частности, для свободного движения  $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$ , поэтому  $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$ , и состояния с определённым 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 рассмотрим для определённости конечные группы, в которых весь набор операторов  $\hat{S}_i$  может быть построен из конечного набора унитарных операторов  $\hat{U}$  — *генераторов группы*. 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 преобразования  $\hat{S}_i$ , и в частности  $\hat{U}$ , не меняют её гамильтониан, т. е. не меняют 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 влечёт за собой равенство

$$\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U} = \hat{H} \Rightarrow [\hat{H}, \hat{U}] = 0. \quad (2.9)$$

Таким образом, если в системе существует некоторая симметрия, то оператор преобразований этой симметрии коммутирует с гамильтонианом, т. е. в силу (2.8) определяет некоторую сохраняющуюся величину. Это утверждение составляет содержание *теоремы Нетер*:

<b>Если система обладает некоторой, симметрией, то существуют сохраняющиеся операторы, отвечающие этой симметрии.</b>	(2.10a)
---	---------

Справедливо и обратное утверждение:

<b>Если в рассматриваемой системе сохраняется какая-то величина, помимо функций от энергии, то система обладает некоторой симметрией.</b>	(2.10b)
---	---------

Принято различать *непрерывные* и *дискретные* симметрии. Примером *дискретной* симметрии является инвариантность по отношению к отражению координат. При этом сохраняющейся величиной является чисто квантовая величина, *чётность*, § 2.3. Примерами *непрерывных* симметрий являются хорошо известные читателю 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 «эле-

Таблица 2.1. **Соотношение:** *инвариантность по отношению к некоторым преобразованиям  $\Rightarrow$  сохраняющиеся физические величины*

<i>Инвариантность по отношению к</i>		<i>Сохраняющаяся величина</i>
сдвигу координат	$\Rightarrow$	импульс $\mathbf{p}$
сдвигу по времени	$\Rightarrow$	энергия $E$
вращениям	$\Rightarrow$	момент импульса $\mathbf{L}$
отражению координат	$\Rightarrow$	чётность $P$
зарядовому сопряжению (частица $\leftrightarrow$ античастица)	$\Rightarrow$	зарядовая чётность $C$

ментарного», *инфинитезимального* (бесконечно малого) преобразования. При этом, например, импульс определяется как аддитивная величина, сохраняющаяся в силу трансляционной инвариантности, именно такой способ использовался в § 1.8. В табл. 2.1 перечислены многие такие соответствия, включая и дискретные законы сохранения (в нижней части таблицы), из них мы обсуждаем только сохранение чётности.

• 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 любое собственное состояние гамильтониана  $|R\rangle$ , мы обнаруживаем, что векторы  $\hat{A}|R\rangle$  и  $\hat{B}|R\rangle$  также являются собственными векторами гамильтониана. Эти векторы, вообще говоря, не совпадают в силу некоммутативности операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  (один из них может совпадать с  $|R\rangle$ ). Таким образом, одному и тому же значению энергии отвечают по крайней мере два разных собственных вектора. Значит, в этом случае стационарные состояния обязательно вырождены.

Если одновременно	$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{H}] &= 0, \\ [\hat{B}, \hat{H}] &= 0, \\ [\hat{A}, \hat{B}] &\neq 0, \end{aligned}$	$\Rightarrow$	<i>стационарные состояния вырождены.</i>	(2.11a)
-------------------	---	---------------	--	---------

Почти всегда справедливо и обратное утверждение:

Если состояния системы вырождены, то существует не менее двух разных операторов, коммутирующих с гамильтонианом и не коммутирующих друг с другом.	(2.11b)
---	---------

Итак, сохранение какой-нибудь величины  $A$  связано обычно с существованием некоторой симметрии. Из (2.11) следует, что наличие нескольких одновременных симметрий в системе приводит к вырождению стационарных состояний. Иногда вырождение стационарных состояний не удаётся связать с какой-нибудь симметрией. В этих (редких) случаях говорят о *случайном вырождении*.

Вырождение состояний нередко оказывается неустойчивым относительно малых возмущений, *на первый взгляд* не нарушающих симметрию. Важный пример являют состояния атомной системы, образующей кристалл. Первоначальное вырождение для каждого иона, обусловленное инвариантностью относительно вращений, снимается под воздействием электрического поля, создаваемого соседями. Однако, и

после этого может оставаться вырождение (связанное с ориентациями спина, см. гл. 10). Это остаточное вырождение снимается под действием колебаний решётки или взаимодействия с далёкими соседями (*эффект Яна-Теллера*).

Система тождественных квантовых частиц обладает симметрией по отношению к перестановке этих частиц. Эта симметрия приводит к ограничениям на набор возможных состояний такой системы, § 13.1.

### § 2.3. Симметрия по отношению к отражениям. Чётность

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

$$\hat{P}\psi(\mathbf{x}) = \psi(-\mathbf{x}). \quad (2.12)$$

Найдём возможные собственные значения оператора  $P$ , т.е. решения уравнения  $\hat{P}\psi(x) = P\psi(x)$ . Так как  $\hat{P}\psi(x) = \psi(-x)$ , то повторное действие этого оператора 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 определённым значением  $P$  говорят, что они обладают определённой **чётностью**.

**Чётность квантовомеханической системы может принимать значения  $P = +1$  (чётное состояние) или  $-1$  (нечётное состояние).**

(Разумеется, в Природе могут реализовываться и состояния без определённой чётности.)

Если при отражении вид гамильтониана не меняется, т.е.  $[\hat{P}, \hat{H}] = 0$ , то чётность сохраняется, величины энергии и чётности одновременно измеримы. При этом можно *выбрать* такой набор стационарных состояний, чтобы каждое из них имело определённую чётность.

Чётность — специфически квантовое понятие. Она не имеет классического аналога, поскольку определяется только для ненаблюдаемой волновой функции, а для классической величины — вероятности — чётные и нечётные состояния неразличимы. Явное выражение оператора отражения координат через операторы координаты и импульса выписано в (4.19). Заметим, что волновые функции фотона и покоящегося  $\pi$ -мезона при отражении меняют знак, их чётности равны  $-1$ .

## § 2.4. Постановки задач для движения одной частицы

Начало отсчёта потенциальной энергии обычно выбирают так, чтобы подчеркнуть исчезновение взаимодействия на больших расстояниях:  $U(\mathbf{r}) \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$ . Постановки соответствующих краевых задач и нормировки волновой функции существенно различаются для случаев  $E < 0$  и  $E > 0$ . Это различие соответствует двум разным типам классического движения<sup>1</sup>.

### 2.4.1. Стационарные состояния

При  $E < 0$  классическое движение частицы *финитно* — она остаётся в конечной области пространства. В соответствующей квантовой задаче можно рассчитывать, что в ограниченной области пространства есть одна частица, т. е. потребовать выполнения условия нормировки в форме (1.11). Этот интеграл сходится, только если волновая функция достаточно быстро убывает на бесконечности. Такое граничное условие приводит к тому, что уравнение Шредингера (2.2) имеет решения — собственные функции — только при некоторых фиксированных значениях энергии — собственных значениях гамильтониана. Это и есть *стационарные состояния дискретного спектра*. Здесь естественная основная задача состоит в поиске этих энергий и волновых функций. Таким задачам посвящена большая часть этого курса.

Энергия системы есть сумма кинетической (положительной) и потенциальной энергий. Для любого физически осмысленного потенциала существует состояние с наименьшей энергией  $E_0$ , параметры которого можно оценить с помощью соотношения неопределённостей, см. примеры на стр. 44. Это состояние называют *основным*. Обычно решения нумеруют в порядке возрастания собственных значений  $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq E_3 \leq \dots$

Сходимость интеграла  $\int |\psi^2(\mathbf{r})| d^3\mathbf{r}$  означает, что частица в основном локализуется в некоторой конечной области. Размер этой области мы оценивали с помощью соотношения неопределённостей. (Однако, в

<sup>1</sup>Используя для описания реальной системы приближения гармонического осциллятора и бесконечно глубокой прямоугольной ямы, мы отказываемся от выбора  $U(\mathbf{r}) \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$ . Получающиеся в таких задачах результаты применимы для описания реальных систем лишь в ограниченной области энергий и расстояний, где можно пренебречь эффектами «остановки» роста потенциала.

отличие от классического случая, существует небольшая вероятность найти частицу и вне этой области.) Более подробные сведения даёт прямое решение уравнения Шредингера (2.2).

При переходе из  $n$ -го состояния дискретного спектра в  $m$ -е выделяется энергия  $E_n - E_m$ . Если при таких переходах излучаются фотоны, их частоты принимают ряд значений  $\omega_{nm} = (E_n - E_m)/\hbar$ , специфический для каждой системы. В этом — причина появления дискретных оптических спектров, неестественных для классических задач без фиксированного размера атомной системы. Эти дискретные спектры дают сведения о том, из каких атомов и молекул состоит наша система.

**Падение на центр.** Пусть в окрестности какой-то точки — примем её за начало координат —  $U(\mathbf{r} \rightarrow 0) \rightarrow -Ar^{-s}$ . Вклад окрестности этой точки  $V$  в полную энергию  $\Delta U = \int_V U(\mathbf{r})|\psi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r}$  зависит от «силы» этой бесконечности  $s$ . При  $s < 2$  вклад  $\Delta U$  конечен, и никаких трудностей не возникает. При  $s > 2$  этот вклад расходится, полная энергия обращается в  $-\infty$ . Обозначим через  $\Delta r$  неопределённость координаты. В оценке с помощью соотношения неопределённостей имеем  $\langle T \rangle \approx (\hbar^2/8m)(\Delta r)^{-2}$  и  $\langle U \rangle \approx -A(\Delta r)^{-s}$ . Минимизация этой суммы даёт  $\Delta r = 0$  и бесконечную отрицательную энергию, у такой системы нет основного состояния, мы имеем дело с *падением на центр*. Та же ситуация имеет место и при  $s = 2$  в случае  $A > \hbar^2/(8m)$ .

Такая ситуация не может реализовываться в реальных физических задачах. В них рост величины потенциала при  $r \rightarrow 0$  всегда останавливается, и решение подобной задачи неполно без добавления информации об этой остановке.

#### 2.4.2. Непрерывный спектр. Задача рассеяния

При  $E > 0$  классическое движение частицы *инфинитно* — она уходит на бесконечность, где имеет энергию  $E = p^2/(2m) > 0$ . В соответствующей квантовой задаче частица может уходить сколь угодно далеко из области действия потенциала. Здесь вся её энергия оказывается кинетической — как при свободном движении, все значения энергии разрешены, т. е. спектр её возможных значений *непрерывен*. При этом условие нормировки (1.11) не может выполняться.

Обычно здесь изучается задача рассеяния — задача о преобразовании падающей плоской волны вследствие взаимодействия с рассеива-

телем (потенциалом) — § 2.7, F.4 и гл. 18. Это — задача о стационарных потоках:

*С давних времён и на все времена откуда-то идёт поток частиц, они могут задерживаться у рассеивателя на какое-то время, но в конце концов числа вошедших и вышедших частиц совпадают.*

Чтобы придать задаче строгий смысл, следует вспомнить, что монохроматических плоских волн не существует, а реализуются лишь составленные из них волновые пакеты (*принцип пакетности* — стр. 24, 30). Именно имея в виду волновые пакеты, можно естественно говорить о падающей волне и отличать её от рассеянной. Граничное условие для уравнения Шредингера сводится к записи волновой функции на больших расстояниях от рассеивателя в виде суммы падающей и рассеянной волн, в одномерной задаче это (2.32), в трёхмерной — (18.2).

С «потребительской точки зрения» в таком подходе нормировка волновых функций для рассеяния даётся естественным обобщением условия (1.11) — нормировкой на поток  $\langle p'|p \rangle = (m/|p|) \delta(p - p')$  (2.6b).

## § 2.5. Одномерные задачи

Многие проблемы изучаются далее на примере задач одномерного движения. Рассматривают три 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 (гл. 9). Здесь отрицательные значения  $r$  не имеют смысла, и в предыдущую задачу вводится потенциал, обращающийся в  $\infty$  при  $r < 0$ . Граничные условия для этой задачи включают требование  $\psi(r = 0) = 0$ .

◇ *Задачи в ограниченной области* описывают движение в фиксированных границах, например, в пределах длинной органической молекулы.

### Свойства решений

- Уравнение Шредингера (2.2) — линейное дифференциальное уравнение второго порядка — имеет два независимых решения при каждом значении  $E$ . 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.

$$\boxed{W = \psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_1'(x)\psi_2(x) = \text{const},} \quad (2.13)$$

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

• В физически реализуемых 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 её производной и непрерывность самой функции, т. е. при  $\epsilon \rightarrow 0$

$$\psi(a+\epsilon) - \psi(a-\epsilon) \rightarrow 0; \quad \psi'(a+\epsilon) - \psi'(a-\epsilon) \rightarrow 0. \quad (2.14a)$$

◇ В частности, пусть при  $x = a$  потенциал  $U(x)$  имеет скачок и кроме того  $U(a+0) > E > U(a-0)$ . Тогда уравнение Шредингера имеет вид

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

и в окрестности этой точки решение можно представить в виде

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

Из условий непрерывности (2.14a) получается  $D=B$ ,  $C=Ak/\varkappa$ , т. е. **правила сшивки** при переходе через точку  $a$  (не меняющие вронскиан (2.13)):

$$\begin{aligned} A \sin [k(x-a)] &\rightarrow A \frac{k}{\varkappa} \text{sh} [\varkappa(x-a)], \\ B \cos [k(x-a)] &\rightarrow B \text{ch} [\varkappa(x-a)]. \end{aligned} \quad (2.14b)$$

◇ При описании некоторых явлений разумное приближение дают модельные потенциалы с бесконечными скачками в  $U(x)$  (пример — бесконечно глубокий потенциальный ящик). Для такой задачи форма второго из условий (2.14а) может измениться. В частности, для уравнения Шредингера (2.2) с потенциалом

$$U(x) = -G\delta(x - a) \quad (2.15a)$$

получается  $\psi'(a + \epsilon) - \psi'(a - \epsilon) = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx [-G\delta(x - a) - E]\psi(x)$ . Обозначив  $g_0 = mG/\hbar^2$ , получаем отсюда

$$\psi'(a + 0) - \psi'(a - 0) = -2g_0\psi(a) \quad \psi(a + 0) = \psi(a - 0). \quad (2.15b)$$

Не надо путать условия сшивки (2.14)–(2.15) с граничными условиями.

• **Кусочно-постоянный потенциал.** Многие ситуации удаётся понять в модели, где потенциал аппроксимируется кусочно-постоянной функцией рис. 1.

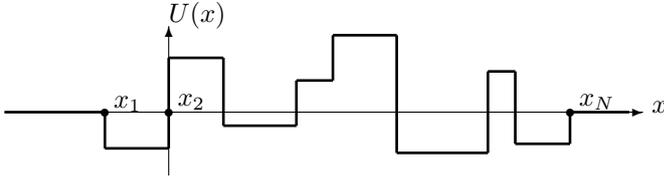


Рис. 1. Кусочно-постоянный потенциал

При подходящем числе делений таким способом можно аппроксимировать любой потенциал. Получившаяся задача поддается простой в принципе вычислительной процедуре. Далее областью действия сил называется отрезок от  $x_1$  до  $x_N$  (где  $U \neq 0$ ). Для описания волновой функции вне этой области мы обозначаем

$$\varkappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar \quad \text{при } E < 0, \quad k = \sqrt{2mE}/\hbar \quad \text{при } E > 0. \quad (2.16a)$$

Техника работы с таким потенциалом идейно проста. Выберем сначала какое-нибудь значение энергии  $E$ . На каждом отрезке, где потенциал имеет постоянное значение  $U(x) = U_i$ , решение уравнения Шредингера

$\psi'' + [2m(U - E)/\hbar^2] \psi = 0$  имеет вид

$$\begin{aligned} A_i e^{ik_i x} + B_i e^{-ik_i x}, \quad k_i = \sqrt{2m(E - U_i)}/\hbar \quad \text{при } E - U_i > 0; \\ A_i e^{-\varkappa_i x} + B_i e^{\varkappa_i x}, \quad \varkappa_i = \sqrt{2m(U_i - E)}/\hbar \quad \text{при } E - U_i < 0. \end{aligned} \quad (2.16b)$$

Иногда вместо суперпозиции экспонент удобно использовать суперпозиции синуса и косинуса (обычного или гиперболического). В этом случае обе независимые волновые функции  $\psi_1$  и  $\psi_2$  можно *выбрать* действительными.

В рассматриваемой физической задаче правее точки  $x_N$  (вне области действия сил) из пары экспонент остаётся только одна, при  $E < 0$  это  $-Ae^{-\varkappa x}$  (в дискретном спектре волновая функция убывает при  $x \rightarrow \infty$ ), при  $E > 0$  это  $-Ae^{ikx}$  (в непрерывном спектре это — прошедшая волна), — по смыслу обозначений  $A$  стоит вместо  $A_{N+1}$ . После этого применение правил сшивки (2.14) при  $x = x_N$  позволяет выразить коэффициенты  $A_N$  и  $B_N$  через  $A$ . Точно так же на границе  $x = x_{N-1}$  использование правил сшивки позволяет выразить коэффициенты  $A_{N-1}$  и  $B_{N-1}$  через  $A_N$  и  $B_N$ , и стало быть через  $A$ . Такое последовательное применение правил сшивки позволяет в конце концов определить коэффициенты  $A_1$  и  $B_1$  — волновую функцию слева от области действия сил. Дальнейшие действия немного различаются при положительных и отрицательных  $E$ . Они обсуждаются в следующих параграфах.

Такой алгоритм реализован в программе `quantx` [19], см. приложение А. С её помощью удаётся рассмотреть колоссальное многообразие ситуаций, возникающих при варьировании формы потенциала, для задач о спектре состояний и их свойствах, о прохождении волн и волновых пакетов и их эволюции со временем.

## § 2.6. Одномерная задача. Дискретный спектр

При  $E < 0$  выполнимо условие нормировки в форме (1.11). Сходимость интеграла (1.11) означает, что  $\psi(x)$  достаточно быстро спадает при  $|x| \rightarrow \infty$ , т. е.

$$\psi(x) \rightarrow 0 \quad \text{при } |x| \rightarrow \infty. \quad (2.17)$$

Это *граничное условие* для  $\psi(x)$  вместе с требованием непрерывности может удовлетворяться только для некоторых значений энергии — соб-

ственных значений гамильтониана  $E = E_n$ , эти значения образуют **дискретный спектр**.

В частности, для кусочно-постоянного потенциала рис. 1 удобно действовать следующим образом. Сначала при произвольной энергии  $E$  справа от области действия сил, при  $x > x_N$ , выберем решение, удовлетворяющее граничному условию,  $Ae^{-\kappa x}$ . Последовательно применяя правила сшивки, получим слева от области действия сил, при  $x < x_1$ , решение в виде

$$\psi = A_1 e^{-\kappa x} + B_1 e^{\kappa x}. \quad (2.18)$$

Коэффициенты  $A_1$  и  $B_1$  выражаются через параметры потенциала и энергию  $E$ . Это выражение определяет решение, отвечающее связанному состоянию, только если коэффициент при растущей налево экспоненте в этом выражении  $A_1 = 0$ . Это условие и есть уравнение на собственные значения гамильтониана в дискретном спектре.

• Перечислим некоторые общие свойства решений одномерной (**но не двумерной и трёхмерной**) задачи в дискретном спектре.

◇ *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 (2.17) и свойства вронскианов (2.13) эти решения не могут быть линейно независимыми, т. е. они совпадают (с точностью до нормировки).

◇ Можно выбрать фазы собственных функций задачи так, чтобы все эти функции были действительными.

◇ *Волновая функция  $\psi_n(x)$ , отвечающая  $n + 1$ -му по величине собственному значению  $E_n$ , обращается в нуль  $n$  раз при конечных  $x$  (примеры — потенциальный ящик, осциллятор). Между двумя любыми нулями  $n + 1$ -го состояния лежит ровно один нуль  $n$ -го состояния (осцилляционная теорема, [1], [2], [8]).*

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.

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

◆ Если при некоторых значениях параметров потенциала возникает решение с  $E = 0$ , то для исчезновения этого уровня достаточно

лишь небольшого изменения этих параметров; в этих случаях говорят о «выталкивании уровня».

### 2.6.1. Прямоугольная потенциальная яма

Важный пример доставляет решение задачи об уровнях энергии в прямоугольной потенциальной яме на бесконечной прямой с  $x_1 = -a$ ,  $x_N \equiv x_2 = a$ :

$$U(x) = \begin{cases} -V & \text{при } |x| < a, \\ 0 & \text{при } |x| > a. \end{cases} \quad (2.19)$$

В нашем решении используются обозначения (ср. (2.16)):

$$\varkappa = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}, \quad k_1 = \frac{\sqrt{2m(V - |E|)}}{\hbar}, \quad K_0 = \frac{\sqrt{2mV}}{\hbar} \quad (\varkappa^2 = K_0^2 - k_1^2).$$

При произвольной энергии  $E < 0$  мы стартуем в области  $x > a$  от волновой функции  $Ae^{-\varkappa x}$ , обращающейся в нуль при  $x \rightarrow \infty$ . Затем поочерёдно применяя правила сшивки на каждой из границ, мы получаем волновую функцию при  $x < -a$ , имеющую вид (2.18) с

$$A_1(\varkappa) = Ae^{-2\varkappa a} \left( \cos 2k_1 a - \frac{k_1^2 - \varkappa^2}{2k_1 \varkappa} \sin 2k_1 a \right), \quad (2.20)$$

$$B_1(\varkappa) = A \frac{K_0^2}{2k_1 \varkappa} \sin 2k_1 a.$$

Граничное условие  $\psi(x) \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow -\infty$  означает, что решение существует только при  $A_1(\varkappa) = 0$ . Это даёт уравнение для определения энергии уровней (как уравнение для определения  $k_1$ )

$$\cos 2k_1 a = \frac{k_1^2 - \varkappa^2}{2k_1 \varkappa} \sin 2k_1 a. \quad (2.21a)$$

После возведения в квадрат и подстановки  $\cos^2 \alpha = 1 - \sin^2 \alpha$  это уравнение преобразуется к виду

$$\left( \frac{K_0^2}{2k_1 \varkappa} \sin 2k_1 a \right)^2 = 1 \Rightarrow \sin 2k_1 a = \pm \frac{2k_1 \varkappa}{K_0^2}, \quad (k_1 \leq K_0). \quad (2.21b)$$

Для собственных состояний в (2.20)  $B_1(\varkappa) = \pm A$ , знак + отвечает решениям, симметричным при отражении координат  $x \rightarrow -x$  — *чётным*,

а знак  $-$  отвечает решениям, антисимметричным при отражении координат — *нечётным*.

Эти уравнения для определения энергии уровней удобно преобразовать в уравнения для  $\operatorname{tg} k_1 a = (1 - \cos 2k_1 a) / \sin 2k_1 a$ . Подставив в последнее тождество  $1 / \sin 2k_1 a$  из (2.21b) и  $\operatorname{ctg} 2k_1 a$  из (2.21a), получим отдельные уравнения для чётных и нечётных состояний

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} k_1 a &= \varkappa / k_1 : \text{чётные состояния;} \\ \operatorname{tg} k_1 a &= -k_1 / \varkappa : \text{нечётные состояния.} \end{aligned} \quad (2.21c)$$

◇ Использованный способ удобен тем, что его результат легко переносится на случай  $E > 0$  (2.40). Поучительно, однако, получить (2.21c) и другим, более быстрым, способом, с учётом симметрии задачи.

Рассматриваемая задача обладает симметрией  $x \leftrightarrow -x$ . Поэтому чётность здесь сохраняется. В соответствии с обсуждением § 2.2, удобно искать общие собственные состояния гамильтониана и оператора пространственного отражения, т. е. отдельно чётные и нечётные состояния:

	чётные состояния		нечётные состояния
$\psi(x) =$	$C \cos k_1 x$ при $ x  < a,$		$A \sin k_1 x$ при $ x  < a,$
	$B e^{-\varkappa( x -a)}$ при $ x  > a,$		$\pm B e^{-\varkappa( x -a)}$ при $a <  x .$

Записав в каждом случае условия непрерывности для  $\psi'(x)$  и  $\psi(x)$  в точке  $x = a$  и поделив одно из получившихся равенств на другое, получаем уравнения для определения энергии уровней в форме (2.21c).

Полученные уравнения позволяют определить величину  $k_1 a$  через единственный параметр задачи  $K_0 a$ , определяющий положения и число уровней. В таком виде уравнения допускают простые графические решения (пересечение графиков величины  $\operatorname{tg} k_1 a$  и объекта в правой части каждого из уравнений (2.21c)). Точки пересечения определяют набор решений  $k_n$  (или  $E_n$ ), мы вновь убеждаемся, что возможные значения энергии стационарных состояний образуют дискретный набор — квантуются. Уравнение для чётных состояний имеет решение при сколь угодно малом значении  $K_0 a$ . Уравнение же для нечётных состояний имеет решение только при  $K_0 a \geq \pi/2$  (когда  $\operatorname{tg} k_1 a$  впервые становится отрицательным), т. е.  $U \geq U_{n0} = (\pi\hbar)^2 / (8ma^2)$ . Из того же анализа графиков для уравнений (2.21c) видно, кроме того, что полное число уровней в яме составляет целую часть величины

$$N_0 = \frac{2K_0 a}{\pi} + 1. \quad (2.22)$$

Для очень глубокой ямы  $K_0 a \gg 1$  при небольших  $k_1$  коэффициент при синусе в правой части (2.21) обращается в бесконечность, и уравнение принимает вид  $\sin 2k_1 a = 0$ , т. е. даёт тот же ответ, который получался для бесконечно глубокой ямы — на длине ямы должно уместиться целое число полуволн. Иначе говоря, приближение бесконечно глубокой ямы хорошо описывает глубокие уровни конечной ямы.

**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  $-(\hbar^2/2m)\psi'' = 0$  с решением  $\psi = Ax + B$ .

### 2.6.2. Мелкая яма, $\delta$ -яма

Для многих задач с гладким потенциалом разумно определить понятие характерной величины этого потенциала  $U_0$  и его характерного размера  $a$ , т. е. таких параметров, что интеграл  $\int U(x)dx \approx U_0 a$ , и величина этого интеграла слабо меняется, если исключить из него область интегрирования  $|x| > a$ . Важный пример, результаты исследования которого полезны для многих приложений, представляет потенциал притяжения с такой характерной величиной  $U_0 < 0$  и размером  $a$ , что величина  $|U_0|$  мала по сравнению с энергией, необходимой для локализации частицы в области  $|x| < a$ , т. е.  $|U_0| \ll \hbar^2/(2ma^2)$ . Иногда более предпочтительной для обсуждений является изучение этой задачи при большом  $a$  (когда  $U_0 \rightarrow 0$ ), тогда говорят, что мы имеем дело с *задачей о мелкой яме*. В других случаях удобно обсуждать эту задачу при  $a \rightarrow 0$  (когда  $U_0 \rightarrow \infty$ ) — *задача о  $\delta$ -яме*. Частным примером такого потенциала является прямоугольная яма с  $K_0 a \ll 1$ .

Мы увидим, что в такой задаче существует единственное связанное состояние — основное, и энергия основного состояния  $-E$  по величине значительно меньше  $U_0$ , а радиус убывания соответствующей волновой функции  $1/\kappa = \hbar/\sqrt{2mE} \gg a$ .

• Для **мелкой ямы** характерная величина потенциала  $U_0$  мала, а его характерный размер  $a$  велик. Рассмотрим волновую функцию в точках  $x = \pm x_1$ , выбранных так, что  $x_1 \gg a$  и одновременно  $x_1 \ll 1/\kappa$ . В этих точках можно считать  $U(\pm x_1) = 0$ . А поскольку масштаб зависимости волновой функции от координаты определяется величиной  $1/\kappa (\gg x_1)$ , можно считать в хорошем приближении  $\psi(x_1) = \psi(-x_1)$ . Чтобы получить соотношения для производной волновой функции, за-

пишем уравнение Шредингера  $\psi''(x) = [2m(U(x) - E)]/\hbar^2 \cdot \psi$  и проинтегрируем его от  $-x_1$  до  $x_1$ . При этом получается

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

При вычислении интеграла можно пренебречь изменением  $\psi$  в правой части, т. е. считать что всюду внутри интервала интегрирования например  $\psi(x) = \psi(x_1)$ . Помимо этого, как мы говорили,  $|E| \ll U_0$ . Поэтому можно пренебречь и вторым членом в квадратных скобках. В итоге соотношение между производными приобретает вид

$$\begin{aligned} \psi'(x_1) - \psi'(-x_1) &= -2g_0\psi(x_1), \quad \text{где} \\ g_0 &= -(m/\hbar^2) \int_{-x_1}^{x_1} U(x) dx \rightarrow mG/\hbar^2, \quad G = - \int_{-\infty}^{\infty} U(x) dx. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Предельный переход обеспечивается тем, что потенциал достаточно быстро убывает при  $|x| > a$ .

•  **$\delta$ -яма.** Ясно, что при изменении масштаба координат  $a$  с сохранением величины параметра  $g_0$  в решении мало что изменится. В частности, при  $a \rightarrow 0$  потенциал принимает вид  $U \Rightarrow -G\delta(x)$ , а соотношение между производными (2.23) имеет вид условия сшивки (2.15). Запишем решение именно для этого случая.

Вне ямы мы имеем свободное уравнение Шредингера с решениями  $e^{\pm\kappa x}$ ,  $\kappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ . Как и в предыдущем разделе, при произвольной энергии  $E < 0$ , стартуя от волновой функции, обращаемой в нуль при  $x \rightarrow \infty$ , с помощью последовательного применения правил сшивки, при  $x < -a$  мы получаем волновую функцию (2.18) с

$$A_1(\kappa) = A \left(1 - \frac{g_0}{\kappa}\right), \quad B_1 = A \frac{g_0}{\kappa}. \quad (2.24)$$

Из условия  $\psi(x) \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow -\infty$  следует, что решение существует только при  $A_1(\kappa) = 0$ . Отсюда получается решение при любом  $g_0 > 0$ :

$$\kappa = g_0 \Rightarrow E = -\frac{\hbar^2 g_0^2}{2m} \equiv -\frac{mG^2}{2\hbar^2}, \quad \psi = \sqrt{g_0} e^{-g_0|x|} \quad \forall |x| \gg a. \quad (2.25)$$

Итак, связанное состояние существует в сколь угодно мелкой или — что то же — в сколь угодно узкой потенциальной яме при единственном условии положительности интеграла (2.23).

Возвращаясь к картине мелкой ямы, полезно заметить, что энергия связанного состояния  $E = -mU_0^2 a^2 / (2\hbar^2)$  — величина второго порядка малости по параметру  $U_0$ , а разброс координат  $\Delta x = 2/g_0$  значительно больше  $a$ , т. е. частица большую часть времени проводит вне ямы — в полном согласии с соотношением неопределённостей.

• Вывод о существовании хотя бы одного уровня в мелкой яме, справедливый для одномерного движения, «портится» с увеличением размерности пространства. В **двумерном случае** энергия уровня значительно ближе к нулю [1]. В **трёхмерном случае** уровня в мелкой яме нет. В частности, радиальная прямоугольная яма [ $U(r) = -U$  при  $r < a$ ,  $U(r) = 0$  при  $r > a$ ] описывается одномерным уравнением Шредингера с  $U(r) = \infty$  при  $r < 0$  ( $r < 0$  не бывает). Решение описывается волновой функцией нечётного состояния задачи (2.19), которая обращается в нуль при  $r = 0$ . Оно существует только при  $U > \pi\hbar^2 / (8ma^2)$ .

### 2.6.3. Две $\delta$ -ямы. Туннелирование

Основу для многих физических обсуждений даёт случай, когда потенциал рис. 1 сводится к паре ям, разделённых областью  $U_i = 0$ . В классической задаче состояния частиц в каждой из ям независимы, они «не знают» друг о друге. В квантовом случае «крылья» волновых функций каждой из ям достигают другой ямы, происходит *туннелирование* между ямами. Поскольку волновая функция вне ямы довольно быстро убывает, обычно туннелирование — слабый эффект, лишь немного меняющий уровни энергии и волновые функции. Однако в случае если энергии уровней в обеих уединённых ямах совпадают, туннелирование может привести к «перекачке» состояний между двумя ямами, наподобие биений при слабой связи между одинаковыми колебательными контурами или грузиками на пружинках.

Основные черты решения этой задачи удобно изучить на примере системы из двух  $\delta$ -ям

$$U(x) = -G_1\delta(x+a) - G_2\delta(x-a). \quad (2.26)$$

Наши действия воспроизводят то, что делалось при получении (2.21). При произвольной энергии  $E = -\hbar^2\kappa^2/2m$ , стартуем при  $x > a$  от вол-

новой функции  $Ae^{-\kappa x}$ , обращающейся в нуль при  $x \rightarrow \infty$ . Последовательно применяя правила сшивки (2.15) в точках  $x = \pm a$ , мы приходим к волновой функции при  $x < -a$  в виде  $A_1 e^{-\kappa x} + B_1 e^{\kappa x}$  (2.18) с

$$A_1(\kappa) = \frac{A}{\kappa^2} [\kappa^2 - \kappa(g_{0,1} + g_{0,2}) + g_{0,1}g_{0,2}(1 - D_a)], \quad (2.27)$$

где  $g_{0,i} = mG_i/\hbar^2$ ,  $D_a = e^{-4\kappa a}$ .

Появившийся коэффициент туннелирования между ямами  $D_a$  показывает, как уменьшается вероятность нахождения частицы с энергией, отвечающей стационарному состоянию, на пути между двумя ямами.

Граничное условие  $\psi(x) \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow -\infty$  означает, что решение существует только при  $A_1(\kappa) = 0$  (коэффициент при растущей направо экспоненте обращается в нуль). Это даёт уравнение для определения уровней

$$\begin{aligned} \kappa^2 - (g_{0,1} + g_{0,2})\kappa + g_{0,1}g_{0,2}(1 - D_a) &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \kappa &= \frac{g_{0,1} + g_{0,2} \pm \sqrt{(g_{0,1} - g_{0,2})^2 + 4g_{0,1}g_{0,2}D_a}}{2}. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Графическое исследование этого уравнения показывает, что оно имеет два решения при больших  $a$  и одно решение при небольших  $a$ . Если расстояние между ямами велико,  $D_a \ll 1$ , то мы имеем дело с уровнями двух уединённых ям,  $\kappa_i = g_{0,i}$ , не зависящими от существования второй ямы, состояния локализованы в окрестности либо первой ямы, либо второй ямы. При  $a \rightarrow 0$  уравнение имеет одно решение  $\kappa = g_{0,1} + g_{0,2}$ , соответствующее одной яме суммарной глубины.

Разберём теперь некоторые важные частные случаи, рассматривая  $D_a$  как параметр, принимающий небольшие значения,  $D_a \ll 1$ .

• **Симметричная система.** Если  $G_1 = G_2 = G$  (одинаковые ямы), система симметрична относительно замены  $x \rightarrow -x$ , решения для волновых функций обладают определённой чётностью.

Мы видим, что первоначальный уровень  $E = E_0 = -\hbar^2 g_0^2/(2m)$  расщепляется на два уровня с энергиями

$$E_{\pm} = E_0 \pm \Delta_S, \quad \Delta_s = 2\sqrt{D_a} E_0 \ll E_0. \quad (2.29)$$

Подстановка полученных решений в волновые функции показывает, что для наименьшей энергии  $E = E_0 - \Delta_S$  волновая функция симметрична, т. е.  $\psi_{0\Pi}(x) = \psi_{0\Pi}(-x)$ , а для энергии  $E = E_0 + \Delta_S$  волновая функция антисимметрична, т. е.  $\psi_{0\Pi}(x) = -\psi_{0\Pi}(-x)$ . При малых

значениях  $D$  волновые функции в каждой из «половинок» ямы слабо отличаются от волновой функции уединённой ямы  $\psi_0(x)$ .

Если в начальный момент времени частица располагалась в окрестности правой ямы ( $\psi(x, t=0) = \psi_{0\Pi}(x)$ ), то через время  $\pi\hbar/\Delta_S$  она окажется в левой яме, т. е. волновая функция осциллирует,

$$\psi(x, t) = e^{-iE_0 t/\hbar} [\psi_{0\Pi}(x) \cos(t/\tau) + i\psi_{0\text{л}}(-x) \sin(t/\tau)], \quad \tau = \hbar/\Delta_S.$$

• **Небольшое отклонение от симметрии.** Рассмотрим случай небольшого отклонения от симметрии, когда глубины уединённых ям мало отличаются друг от друга,  $|G_1 - G_2| \ll G_1$ . Удобно обозначить

$$g_0 = (g_{0,1} + g_{0,2})/2 \Rightarrow E_0 = -\hbar^2 g_0^2/(2m) \quad \delta g_0 = g_{0,1} - g_{0,2}$$

так, что энергии уединённых ям составляют

$$E_{0\text{л}} = E_0 - \delta, \quad E_{0\Pi} = E_0 + \delta, \quad \delta = \hbar^2 g_0 \delta g_0/m \ll E_0. \quad (2.30)$$

Прямая подстановка в решение (2.28) даёт энергии уровней в виде

$$E_{\pm} = E_0 + \Delta, \quad \Delta = \pm \sqrt{\delta^2 + \Delta_S^2}. \quad (2.31)$$

Отсюда видно, что при  $\Delta_S < \delta$  туннелирование почти не меняет уровней. Наоборот, при  $\Delta_S > \delta$  расщепление термов близко к тому, что было в симметричном случае (система забывает об исходной малой асимметрии). Прямое вычисление волновой функции в указанных предельных случаях показывает следующее.

∇ При  $\Delta_S \gg \delta$  расщепление исходных термов  $\delta$  несущественно по сравнению с эффектом туннелирования, смешивающего состояния. При  $\Delta < 0$  волновая функция симметрична (*волновая функция основного состояния не имеет нулей*), а при  $\Delta > 0$  волновая функция антисимметрична — как и в случае, когда расщепление исходных термов  $\delta$  отсутствует. Для стационарных состояний вероятности пребывания в левой и правой ямах одинаковы, как и в случае симметричной ямы. Как и для симметричного случая, если сосредоточить начальное состояние вблизи одной из ям, с течением времени оно перетечёт в другую, возникнут биения с частотой  $\tau = 2\hbar/\Delta_S = 2T/\sqrt{D}$ .

∇ При  $\delta \gg \Delta_S$  состояния с высокой точностью остаются локализованными справа или слева, туннелирование почти не меняет состояний, биений не возникает. Нетрудно убедиться, что при  $\Delta > 0$  система локализуется в правой яме, вероятность найти её в левой яме

очень мала. Точно так же для состояния с  $\Delta < 0$  легко получается  $w_{\text{пр}}/w_{\text{л}} \approx (2\delta/\Delta_s)^2 \gg 1$ , т.е. система локализуется в правой яме, вероятность найти её в левой яме очень мала.

Итак, если имеются две немного различающиеся ямы, то при большом расстоянии между ними — когда коэффициент туннелирования очень мал — возможные состояния локализованы вблизи этих ям. По мере сближения ям — при увеличении коэффициента туннелирования — происходит обобществление состояний, и при  $\Delta_S > \delta$  мы приходим к симметричным или антисимметричным состояниям и к биениям между двумя ямами. В Приложении F.3 подобные выводы получены для пары гладких ям с помощью квазиклассического приближения.

## § 2.7. Непрерывный спектр. Задача рассеяния

В стандартном случае  $U(x \rightarrow \pm\infty) = 0$  состояния непрерывного спектра отвечают положительной энергии. Из уравнения Шредингера легко получается, что при  $x \rightarrow \pm\infty$  волновые функции состояний непрерывного спектра с энергией  $E$  имеют вид волн, распространяющихся налево или направо  $e^{\pm ikx}$ , где  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ , или любой их линейной комбинации, например стоячих волн  $\cos kx$  и  $\sin kx$ . Таким образом, в частности, видно, что состояния непрерывного спектра двукратно вырождены.

### 2.7.1. Постановка задачи

При  $E > 0$  (см. разд. 2.4.2) 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

$$\psi \rightarrow N \begin{cases} (e^{ikx} + i f(k, -k) e^{-ikx}) & \forall x \rightarrow -\infty, \\ (e^{ikx} + i f(k, k) e^{ikx}) & \forall x \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (2.32)$$

и требуется найти амплитуду рассеяния  $f(k, k')$ , где  $k' = \pm k$ .

Выбор  $N = \sqrt{m/(\hbar k)}$  отвечает нормировке на поток. Обозначения для амплитуды рассеяния выбраны по аналогии со стандартными обозначениями трёхмерной задачи, гл. 18. В частности,  $iNf(k, -k)e^{-ikx}$  и  $iNf(k, k)e^{ikx}$  вместе представляют собой волны, расходящиеся от рассеивателя, а  $\sigma = |f(k, k)|^2 + |f(k, -k)|^2$  — величину полного потока, идущего от рассеивателя. В трёхмерной задаче подобная величина называется *полным сечением рассеяния*, оно обсуждалось в курсе классической механики.

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

◇ Формулы (2.32) описывают ситуацию когда волна падает слева, затем отражается влево и частично уходит направо. Для рассеяния «справа налево», когда исходная волна приходит справа, точно так же

$$\psi_2 \rightarrow N(e^{-ikx} + A_2 e^{ikx}) \quad \forall x \rightarrow \infty, \quad \text{и} \quad \psi_2 \rightarrow NB_2 e^{-ikx} \quad \forall x \rightarrow -\infty.$$

Приравнивая значения вронскиана (2.13)  $\psi\psi'_2 - \psi'\psi_2$  при  $x \rightarrow \infty$  и  $x \rightarrow -\infty$ , получаем  $B = B_2$ , т.е. мы обнаруживаем, что амплитуды прохождения при рассеянии справа налево и слева направо совпадают (амплитуды отражения  $A$  и  $A_2$  могут различаться фазами).

### 2.7.2. Оптическая теорема. Общие свойства амплитуды

• В процессе рассеяния вероятность сохраняется, т.е. сумма прошедшего и рассеянного потоков частиц совпадает с первоначальным потоком. Это равенство составляет содержание **оптической теоремы**

$$\begin{aligned} & |1 + if(k, k)|^2 + |f(k, -k)|^2 = 1 \\ \Rightarrow & \boxed{2 \operatorname{Im} f(k, k) = \sum_{k'=\pm k} |f(k, k')|^2 \equiv \sigma.} \end{aligned} \quad (2.33)$$

В трёхмерном случае соответствующее соотношение (18.12) получается менее тривиальным образом.

• Для кусочно-постоянного потенциала используется алгоритм, изложенный на стр. 68. Удобно стартовать с прошедшей волны и переходить к падающей + отраженной. Выражение для амплитуды  $A_1$ , полученное для задачи о собственных состояниях, превращается в выражение для этой амплитуды в задаче рассеяния при замене в области

свободного движения  $-\varkappa \rightarrow ik$  (справа убывающая волна заменяется на уходящую направо). После этого остаётся только отнормировать падающую волну на 1, т. е. поделить все амплитуды на  $A_1(\varkappa = -ik)$ .

Из этого построения видно, что коэффициент прохождения обращается в бесконечность при отрицательных значениях энергии, отвечающих положениям уровней (2.25) или (2.21с), когда в амплитуде рассеяния делается замена  $k \rightarrow i\varkappa$ . Ясно, что этот вывод справедлив для любого кусочно-постоянного потенциала. Произвольный одномерный потенциал можно аппроксимировать кусочно-постоянным, и качество приближения может быть сделано сколь угодно хорошим при использовании достаточно большого числа ступеней. Поэтому наш вывод распространяется на произвольный одномерный потенциал. Итак,

**полюса амплитуды рассеяния при  $E < 0$  отвечают связанным состояниям при этих значениях энергии.**

 (2.34)

### 2.7.3. Примеры

• Для некоторых приложений оказывается полезным рассмотреть **нефизический случай**<sup>1</sup>, когда потенциал не обращается в нуль на  $\infty$  («ступенька»):

$$U(x) \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{при } x \rightarrow -\infty, \\ -V & \text{при } x \rightarrow \infty, \end{cases} \quad K_0 = \sqrt{\frac{2mV}{\hbar^2}}. \quad (2.35)$$

Тогда нормировки потоков слева и справа от ступеньки различны, и взамен (2.32) 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 даёт амплитуду рассеяния

$$f(k, -k) = i \frac{k_1 - k}{k_1 + k}, \quad f(k, k_1) = i \frac{(\sqrt{k_1} - \sqrt{k})^2}{k_1 + k}. \quad (2.36)$$

<sup>1</sup>Смысл этого примера — обратить внимание на изменение нормировки.

Нетрудно убедиться, что коэффициенты отражения  $R = |f(k, -k_1)|^2$  и прохождения  $T = |1 + if(k, k_1)|^2$  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  $\psi \rightarrow (B/\sqrt{\varkappa})e^{\varkappa x}$ ,  $\varkappa^2 = 2m(V - E)/\hbar^2$ , при этом  $T = 0$ ,  $R = 1$ . *Оптический аналог* — полное внутреннее отражение при движении из  $+\infty$ .

• Для рассеяния на  $\delta$ -яме, разд. 2.6.2 такое соответствие позволяет получить амплитуду рассеяния и коэффициент прохождения  $T \equiv |1 + if(k, k)|^2$  из (2.24):

$$1 + if(k, k) \equiv \frac{1}{A_1(\varkappa = -ik)} = \frac{1}{1 - ig_0/k} \Rightarrow T = \frac{1}{1 + g_0^2/(k^2)}. \quad (2.37a)$$

Переход от  $\delta$ -ямы к  $\delta$ -барьеру описывается заменой  $g_0 \rightarrow -g_0$ . Таким образом коэффициенты прохождения для  $\delta$ -ямы и  $\delta$ -барьера одинаковы, если глубина ямы и высота барьера одинаковы. Полезно заметить также, что при  $k \ll g_0$  и барьер и яма одинаково почти непрозрачны, в этом случае коэффициент прохождения называют ещё *коэффициентом туннелирования*  $D$  — ср. (2.27)

$$T \equiv \sqrt{D} \approx k/g_0. \quad (2.37b)$$

Для использования в некоторых приложениях обсудим, как выглядит полная система функций, являющихся решениями задачи о  $\delta$ -яме. Это система содержит собственную функцию связанного состояния (2.25) и решения задачи рассеяния, распространяющиеся справа налево  $\psi_r$  и слева направо  $\psi_\ell$ . Взамен этих решений можно рассмотреть их симметричную и антисимметричную комбинации  $\psi_\pm \equiv (\psi_r \pm \psi_\ell)/\sqrt{2}$ . Симметричная комбинация содержит  $\cos |kx|$ . Антисимметричная комбинация  $\psi_-$  «не замечает»  $\delta$ -яму, т. е. она сводится к выражению, получающемуся для свободного движения

$$\psi_- \propto \sin kx, \quad \psi_+ \propto \cos(|kx| + \delta_s). \quad (2.38)$$

Для вычисления  $\delta_s$  можно использовать (2.37a).

• Для прямоугольной потенциальной ямы (2.19) можно использовать решение (2.20). При этом получаются выражения для амплитуды прошедшей волны  $1 + if(k, k)$  и коэффициента прохождения

$$1 + if(k, k) \equiv \frac{1}{A_1(x = -ik)} = \frac{e^{-2ika}}{\cos 2k_1 a - i \frac{k^2 + k_1^2}{2kk_1} \sin 2k_1 a}$$

$$\equiv \frac{e^{-2ika}}{e^{-2ik_1 a} - i \frac{(k - k_1)^2}{2kk_1} \sin 2k_1 a} \equiv \frac{e^{-2i(k-k_1)a}}{1 - i \frac{(k - k_1)^2}{2kk_1} e^{2ik_1 a} \sin 2k_1 a}; \quad (2.39a)$$

$$T = |1 + if(k, k)|^2 = \left[ 1 + \left| \frac{K_0^2}{2kk_1} \sin(2k_1 a) \right|^2 \right]^{-1}. \quad (2.39b)$$

Здесь мы обозначили  $K_0^2 = 2mV/\hbar^2$ . Эти соотношения полностью описывают и рассеяние на яме и рассеяние на барьере при энергиях, больших высоты барьера.

∇ При энергиях, меньших высоты барьера, величина  $k_1$  становится чисто мнимой  $k_1 \rightarrow i\kappa_1$ , и при  $\kappa_1 a \gg 1$  последнее соотношение даёт экспоненциально малый коэффициент прохождения через барьер (*коэффициент туннелирования через барьер D* (2.27)) — ср. (2.37b)

$$T \equiv D \approx e^{-2\kappa_1(2a)}. \quad (2.40)$$

∇ Видно, что при условии  $2k_1 a = n\pi$  (на яме укладывается целое число полуволин) яма становится прозрачной,  $T = 1$ . Коэффициент прохождения принимает наименьшие значения вблизи таких значений энергии, что  $2k_1 a = (n + 1/2)\pi$ , при этом  $T_{min} \approx \frac{2kk_1}{k^2 + k_1^2}$ . При небольшой энергии, когда  $k \ll k_1$  для ямы или  $k_1 \ll k$  для барьера величина  $T_{min}$  очень мала. С ростом энергии коэффициент прохождения осциллирует, причём глубина и число заметных осцилляций определяется той же величиной  $2K_0 a$ , что определяет и структуру уровней ямы. Более детальное вычисление показывает, что в условиях резонанса амплитуда волновой функции внутри ямы или над барьером значительно больше амплитуды падающей волны. Дело происходит таким образом, как будто падающий поток попадает в резонатор, накапливается там и по-немногу выходит через его полупрозрачную границу. Единичный коэффициент прохождения является произведением большой амплитуды

сигнала в резонаторе на малую проницаемость его стенки. При дальнейшем росте энергии величины  $k$  и  $k_1$  сближаются, величина  $T_{min}$  приближается к 1, осцилляции становятся незаметными.

*Осцилляции зависимости коэффициента прохождения от энергии являются специфическим свойством потенциала с вертикальными стенками, допускающего резонансные отражения на стенках при некоторых энергиях. На гладком потенциале таких осцилляций может и не быть.*

#### 2.7.4. Время задержки волны на потенциале

Запишем выражение для амплитуды прошедшей волны в виде  $1 + if(k, k') = \sqrt{T}e^{i\alpha}$  так, что прошедшую волну далеко за рассеивателем можно записать как  $\sqrt{T}e^{-i(\omega t - \alpha) + ikx}$ . Видно, что величину  $\alpha/\omega$  может считать «фазовым» временем задержки на потенциале. Имея в виду применения этого понятия для описания волновых пакетов, целесообразно ввести понятие «группового» времени задержки на потенциале (далее эпитет «групповой» опускается):

$$\tau(E) \stackrel{def}{=} \frac{d\alpha}{d\omega} \equiv \hbar \frac{d\alpha}{dE}. \quad (2.41)$$

(Схожим образом определяется и время задержки отражённой волны.)

Характер зависимости  $\tau$  от энергии  $E$  для задачи о прямоугольной яме или барьере можно понять, анализируя формулу (2.40). Мы ограничимся описанием результатов компьютерного моделирования. Оказывается, что при больших  $|K_0 a|$  время задержки в зависимости от энергии осциллирует, качественно воспроизводя осцилляции коэффициента прохождения. Причиной этого являются многократные отражения в пределах ямы при выполнении условия резонанса  $2k_1 a = n\pi$ .

## § 2.8. Квазистационарные состояния. Нестабильные частицы

Возбуждённые состояния квантовых систем нестационарны, они распадаются (излучение ядер, атомов, молекул, радиоактивный распад ядер и т. д.). Эти состояния называют *квазистационарными*. Используют и другие названия: *нестабильное состояние, нестабильная частица, квазиуровень, резонанс*. Состояние нестабильной частицы характе-

рисуется её временем жизни  $\tau$  (2.43). Ниже мы обсуждаем подробно ситуацию, когда продолжительность процесса сопоставима<sup>1</sup> с  $\tau$ .

- *Обсудим сначала, как выглядит явление в случае, когда постоянный поток частиц поддерживается неограниченно долгое время (стационарный случай).* Именно этот случай наблюдается при изучении задачи рассеяния на многоступенчатом потенциале (*рассеивателе*  $\mathcal{R}$ ) при компьютерном моделировании (приложение А). Оказывается, что при некоторых значениях энергии  $E = E_\tau$  квадрат волновой функции в области  $\mathcal{R}$  становится в среднем значительно больше, чем в падающей и прошедшей волне<sup>2</sup>. Ситуацию можно представить так, что наша частица «предпочитает» жить внутри рассеивателя, напоминая этим стационарное состояние. Чем уже интервал энергий, внутри которого происходит упомянутое усиление, тем сильнее увеличивается волновая функция в области рассеивателя.

- *Обсудим теперь проявление квазистационарного состояния в судьбе волны (пакета), налетевшей на рассеиватель  $\mathcal{R}$  (развертывание процесса во времени).* Случайно организованный волновой пакет, локализованный сначала в конечной области пространства, по пути расплывается. Достигая рассеивателя, часть пакета быстро проходит его, но некоторая часть пакета остаётся в  $\mathcal{R}$  на сравнительно большое время, постепенно уходя в обе стороны от рассеивателя (отраженная и прошедшая волны малой амплитуды с большой задержкой). Таким образом, рассеиватель вырезает из пакета «пакетик» — часть, похожую на стационарное состояние. Именно этот объект и называют квазистационарным состоянием.

---

<sup>1</sup>Большой класс явлений отвечает ситуации, когда продолжительность элементарного процесса значительно меньше  $\tau$ . В таких задачах описание эволюции системы можно разделить на три стадии — рождение системы, её эволюцию в течение времени жизни и распад. Каждая из этих стадий подлежит отдельному описанию. Пример являет ядро урана, родившееся в процессе звёздного синтеза со временем жизни 6.5 млрд лет. Затем оно жило внутри пород, его добывали, переносили и т. п. После этого оно распалось либо самопроизвольно или под действием нейтрона в реакторе за ничтожное время порядка  $10^{-22 \div 23}$  с.

Подчеркнём, что в квантовой теории **распад** почти никогда нельзя понимать только как **развал** первоначального сложного объекта на составляющие его кусочки. Так, нейтрон нестабилен, он распадается на протон, электрон и (анти)нейтрино, но мне не известны задачи, в которых нейтрон полезно представлять, как набор этих трёх частиц. При распаде одна частица превращается в другие, и только.

<sup>2</sup>Подобное явление известно в электротехнике — если в цепи переменного тока есть резонансный контур, то при частотах, близких к резонансу, напряжения и токи в этом контуре могут многократно превосходить входные напряжение и ток.

Механизм задержки волны в рассеивателе допускает такую интерпретацию. При энергии  $E_r$ , обеспечивающей полную прозрачность рассеивателя, многократное последовательное отражение волны от границ внутри системы даёт волну с той же фазой, при этом частица надолго задерживается над рассеивателем (ямой, барьером или их набором). В итоге коэффициент прохождения принимает максимально возможное значение 1, а отражённой волны нет<sup>1</sup>. Точно так же наличие резонанса в рассеянии для трёхмерного случая ведёт к увеличению амплитуды рассеяния при соответствующей энергии (разд. 18.5.3).

Естественно, что среднее значение энергии квазистационарного состояния совпадает с  $E_r$ . Разброс энергий в пакете (ширина состояния)  $\Gamma$  определяет время его существования<sup>2</sup>  $\tau = \hbar/\Gamma$ . Мы убедимся в справедливости этих общих утверждений на некоторых примерах ниже.

◇ Накопление частиц в рассеивателе сопровождается задержкой волны  $\tau$  (2.41). Разумеется, говорить о накоплении частиц можно только если за время  $\tau$  проходит много периодов волны  $\hbar/E_r$ , т. е. если велика «добротность»

$$Q = \tau E_r/\hbar \equiv E_r/\Gamma \gg 1. \quad (2.42)$$

При  $Q \lesssim 1$  наше качественное описание теряет смысл, хотя полюса амплитуды рассеяния в комплексной плоскости энергии могут существовать.

• Рассмотрим систему атомов или ядер, в которой отдельные частицы распадаются независимо друг от друга. Это — хорошее приближение для большинства изучаемых систем<sup>3</sup>. В такой системе вероятность ухода из возбуждённого состояния с энергией  $E_r$  за единицу времени для каждого атома или ядра не зависит от общего числа атомов или ядер в системе, т. е. имеет место закон распада

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

<sup>1</sup>Подобным образом усиливается сигнал внутри объёмного резонатора или внутри интерферометра Фабри–Перо.

<sup>2</sup>Для излучения фотона говорят о *цуге волн* длиной  $c\tau$  — см. § 17.4.

<sup>3</sup>При долгом наблюдении в системах с умеренно большой плотностью полное рассмотрение должно включать и процессы *рекомбинации* — столкновения осколков, порождающих исходное состояние. В системах экстремально большой плотности приближение независимости отдельных распадов может нарушаться, в них могут иметь место непривычные для многих коллективные явления.

Поскольку  $N = \int |\psi|^2 dx$ , а для стационарного состояния  $\psi \propto e^{-iE_r t/\hbar}$ , то в нашем случае зависимость волновой функции от времени выглядит как  $e^{-i(E_r - i\Gamma/2)t/\hbar}$ , где  $\Gamma = \hbar\gamma$ . В соответствии с этим определяются (ср. (2.42))

$$\begin{array}{l} \text{время жизни (квази-)уровня } \tau = \gamma^{-1}, \\ \text{ширина (квази-)уровня } \Gamma = \hbar\gamma \equiv \hbar/\tau, \\ \text{комплексная энергия уровня } \tilde{E}_r = E_r - i\Gamma/2. \end{array} \quad (2.43)$$

• Получающийся из выражения для комплексной энергии  $\tilde{E}$  импульс, имеет отрицательную мнимую часть,  $\text{Im}(\tilde{p}) \equiv \text{Im}(\sqrt{2m\tilde{E}}) < 0$ , т.е. дело выглядит так, как будто на больших расстояниях от рассеивателя волновая функция экспоненциально растёт  $\sim e^{x|\text{Im}(\tilde{p})|}$ . В частности, она перестаёт быть нормируемой. Эта трудность — результат использования приближения вне области его применимости. Дело в том, что на больших расстояниях от рассеивателя волновой пакет сильно расплывается, а ни одна из его плосковолновых компонент никакого роста на больших расстояниях не имеет.

• Итак, состояние нестабильной частицы  $\psi(x, t)$  не есть стационарное состояние (с определённой энергией)  $\psi_E(x)e^{-iEt/\hbar}$ , а волновой пакет — суперпозиция таких состояний  $\psi(x, t) = \int c_E \psi_E(x) e^{-iEt/\hbar} dE$ , где коэффициенты  $c_E$  описывают этот пакет в энергетическом представлении. В общем случае вероятность  $W(t)$  и амплитуда вероятности  $a(t)$  того, что система к моменту времени  $t$  останется в начальном состоянии даётся интегралом (мы учитываем, что стационарные состояния с различными энергиями ортогональны,  $\int \psi_{E'}^*(x) \psi_E(x) dx \propto \delta(E' - E)$ )

$$\begin{aligned} a(t) &= \int \psi^*(x, 0) \psi(x, t) dx \equiv \int c_{E'}^* \psi_{E'}^*(x) c_E \psi_E(x) e^{-iEt/\hbar} dx dE dE' = \\ &= \int |c_E|^2 e^{-iEt/\hbar} dE, \quad W(t) = |a(t)|^2. \end{aligned} \quad (2.44)$$

**Зависимость вероятности распада от времени определяется энергетическим распределением начального состояния** (В. А. Фок и Н. М. Крылов).

Считая для  $\psi(x, t)$  выполненным приближение (2.42), вычислим зависимость волновой функции  $c_E$  от энергии, если энергия распадающегося состояния есть  $E_r$  (см. (2.47))

$$c_E = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \psi(t) e^{iEt/\hbar} dt \propto \frac{R}{E - E_r + i\Gamma/2}. \quad (2.45)$$

Квазиуровням в комплексной плоскости энергии отвечают полюса при  $E = E_r - i\Gamma/2$  в нижней полуплоскости и с положительной действительной частью.

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

$$dW(E) \propto |c_E|^2 \rightarrow \frac{\Gamma}{(E - E_r)^2 + \Gamma^2/4}. \quad (2.46)$$

При  $\Gamma \rightarrow 0$  имеем  $dW/dE \rightarrow (\pi/2)\delta(E - E_r)$  (ср. (B.2)).

По условию для первоначального пакета  $\int_V |\psi(x, 0)|^2 dx \approx 1$  (здесь значок  $V$  означает «рассеиватель»). Со временем пакет уплывает из рассеивателя, вероятность найти частицу внутри рассеивателя падает по закону

$$\int_V \left| \int dE \frac{R}{E - E_r + i\Gamma/2} \psi_E(x) e^{-Et/\hbar} \right|^2 dx \propto e^{-t\Gamma/\hbar} \equiv e^{-t/\tau}. \quad (2.47)$$

Это означает, что поток частиц устремлён от рассеивателя наружу. Таким образом, поиск квазиуровня можно вести как поиск того (комплексного) значения энергии, для которого в задаче рассеяния коэффициент отражения обращается в бесконечность, или — что то же — в задаче о собственных значениях есть лишь уходящие от рассеивателя волны, но уже с комплексной энергией.

В таком подходе распад нестабильного состояния — это переход системы из состояния, где частицы, за которыми мы следим, сначала находятся вблизи рассеивателя, но со временем уходят оттуда. Мы интересуемся только числом частиц в (более или менее широкой) области вблизи рассеивателя. Вероятность пребывания частицы в этой области со временем падает — **явно нарушается сохранение вероятности в конечной области пространства**. Разумеется, при этом растёт со временем вероятность найти частицу на очень большом расстоянии от рассеивателя, но эти дали не являются предметом нашего изучения.

- Отметим, что для заряженной частицы возбуждённые состояния нестационарны, поскольку она может переходить на нижележащий уровень, излучая фотон (излучение). Вероятность дипольного излучения, определяющая *собственную ширину уровня*, вычисляется в гл. 17.

### 2.8.1. Грубая модель распада

Рассмотрим состояния частицы на полупрямой при наличии  $\delta$ -барьера:

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

Эта система может претендовать на очень грубое подобие нестабильному атомному ядру. Область  $x < a$  описывает «внутренность» ядра — мы и будем называть её ядром.

Эта система похожа на бесконечно глубокую потенциальную яму с шириной  $a$ , имеющую дискретные уровни, отвечающие целому числу полувольт на яме, с энергиями  $E_n = (\hbar k_n)^2/2m$ , где  $k_n = \pi n/a$ . Наличие барьера допускает туннелирование — частицы могут убежать на бесконечность, т.е. стационарные состояния невозможны. Мы рассмотрим случай, когда барьер достаточно «сильный», т.е. коэффициент прохождения через него (2.37) мал:

$$(k/g_0)^2 \ll 1, \quad \text{где } g_0 = mG/\hbar^2.$$

При этом частица может надолго задержаться внутри ядра, так что возникнет квазистационарное состояние.

◆ При заданной энергии  $E$  решение представляет собой суперпозицию экспонент  $e^{ikx}$  и  $e^{-ikx}$ , где  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ . При  $x = 0$  волновая функция обращается в нуль, т.е. внутри ядра  $\psi = A \sin(kx)$ . Справа от барьера удобно обозначить  $\psi = C_1 e^{ik(x-a)} + C_2 e^{-ik(x-a)}$ . Условия сшивки (2.23) принимают вид

$$C_1 + C_2 = A \sin(ka) \quad \text{и} \quad ik(C_1 - C_2) - Ak \cos(ka) = 2g_0 A \sin(ka).$$

Решение этих уравнений даёт

$$\begin{aligned} C_1 &= (iA/2) [(-i + 2g_0/k) \sin(ka) + \cos(ka)], \\ C_2 &= (-iA/2) [(i + 2g_0/k) \sin(ka) + \cos(ka)]. \end{aligned} \quad (2.48)$$

◇ Рассмотрим сначала случай монохроматической волны, падающей на ядро справа, для неё  $C_2 = \sqrt{m/\hbar k}$  (нормировка на поток). При действительных  $k$  имеем  $C_1 = C_2^* = \sqrt{m/\hbar k}$ .

Чтобы найти амплитуду волны внутри ядра, рассмотрим (2.48) как уравнение для определения  $A$ . Наличие большого коэффициента  $g_0/k$

в правой части приводит к тому, что при почти всех значениях  $k$  амплитуда волны внутри ядра значительно меньше амплитуды падающей волны  $|A/C_2| \lesssim k/g_0$  — волна почти не проникает внутрь ядра.

При энергии, отвечающей уровню в ядре  $k = k_n$ ,  $\sin(ka) = 0$ ,  $|\cos(k_n a)| = 1$ , и амплитуды внутри и вне ядра сравниваются,  $|A| = 2|C_2| \equiv |C_1 + C_2|$  — за счёт многократных отражений волна в итоге «не замечает» стенку.

Чтобы упростить запись, мы рассмотрим далее только случай  $n = 1$  (основное состояние внутри ядра). При этом коэффициент прохождения (туннелирования) через барьер

$$D = \left(\frac{k_1}{g_0}\right)^2 \ll 1, \text{ и мы обозначим } Z = 2/\sqrt{D}. \quad (2.49)$$

В узкой полосе частот вблизи «уровня» запишем разложение

$$k = k_1 + \frac{-1 + \rho}{Za} \equiv \frac{\pi + (\rho - 1)/Z}{a}. \quad (2.50)$$

Пренебрегая поправками второго порядка по  $1/Z$ , перепишем теперь уравнение для  $A$  в виде

$$A = -2iC_2 \left[ (i + Z) \frac{(\rho - 1)}{Z} + 1 \right].$$

Отсюда получается

$$|A| = \frac{2|C_2|}{\sqrt{(1/Z^2) + \rho^2}}.$$

Таким образом, при  $\rho = 0$  амплитуда поля внутри ядра резонансно усилена в  $Z$  раз. Полуширина этого резонанса отвечает тем значениям  $k$ , при которых амплитуда в  $\sqrt{2}$  раз меньше максимальной, — это  $\rho = \pm(1/Z)$ . В шкале энергий ширина резонанса

$$2\Gamma = E[k_1 - 1/(Za) + 1/(Z^2a)] - E[k_1 - 1/(Za) - 1/(Z^2a)].$$

С учётом (2.49) отсюда получается

$$\Gamma = \frac{2\hbar^2\pi}{ma^2Z^2} \equiv \hbar \frac{p_1}{2ma} \cdot D \quad (p_1 = \frac{\pi\hbar}{a}). \quad (2.51)$$

◆ Обсудим теперь эволюцию состояния частицы, первоначально локализованной внутри ядра. Чтобы добиться этой локализации, энергия частицы должна быть близка к энергии уровня, например  $E_1$ . Со временем частица «просачивается» сквозь стенки — происходит расплывание пакета. Такой пакет — нестационарное состояние — можно описывать теми же волновыми функциями, что и выше, но с комплексными значениями энергии. При этом снаружи имеется только уходящая волна, т. е. в (2.48) должно быть  $C_2 = 0$ . Решим уравнение  $C_2 = 0$ . Из-за наличия большого коэффициента  $g_0/k$  решение может существовать только при  $|\sin(ka)| \ll 1$ , т. е. при  $k \approx k_n$ . Для упрощения изложения рассмотрим только случай  $k \approx k_1$ . Далее мы воспользуемся разложением (2.50), но с комплексным  $\rho$ . В пренебрежении поправками второго порядка по  $1/Z$  условие  $C_2 = 0$  даёт  $\rho = -i/Z$ . При этом энергия уровня приобретает небольшую мнимую добавку  $E_1 \rightarrow \tilde{E}_1 = E_1 - i\tilde{\Gamma}/2$ , определяемую подстановкой в выражение для энергии  $k_1 a \rightarrow \pi - 1/Z - i/Z^2$ . Удерживая только главные члены разложения по  $1/Z$ , получаем с учётом (2.49) для  $\tilde{\Gamma}$  выражение в точности совпадающее с полушириной резонанса  $\Gamma$  (2.51) — в полном соответствии с общей картиной, обсуждавшейся в предыдущем параграфе.

◇ Для классического движения частицы внутри ядра скорость  $v = p_1/m$  и период движения частицы внутри ядра  $T_{\text{кл}} = (2a/v)$ . С учётом этого выражение (2.51) для ширины уровня перепишем в виде

$$\Gamma = \hbar D / T_{\text{кл}} \Rightarrow \tau = T_{\text{кл}} / D. \quad (2.52)$$

Таким образом, можно говорить, что в течение «жизни» квазистационарного состояния  $\tau \equiv \hbar/\Gamma$  частица подходит к барьеру один раз за период  $T_{\text{кл}}$  и при каждом из подходов просачивается через этот барьер с вероятностью  $D$ . Частицу можно считать полностью ушедшей из ядра после  $1/D$  подходов к границе.

Для атомной 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. Учёт коэффициента туннелирования значительно увеличивает это время. Из этой численной оценки видно, что наш простой подход не работает для атомных или твердотельных систем при изучении воздействия на них сигналов с частотой выше  $10^{15}$  Гц.

◆ Важнейшую роль в получении решения сыграла малость коэффициента прохождения (туннелирования)  $D$ . Описание ширины ква-

зистационарного состояния с помощью (2.52) хорошо работает во всех известных случаях при  $D \ll 1$ . Для гладкого барьера эта картина воспроизводится и в квазиклассическом приближении, приложение F.2.2.

В «реалистической» модели барьера результат (2.52) позволяет получить неплохое описание  $\alpha$ -распада радиоактивного ядра, разд. 6.5.1. В Приложении F.2.1 сходная картина вместе с выводом (2.52) получается для более технически сложной модели двух  $\delta$ -барьеров на бесконечной прямой.

### 2.8.2. Виртуальный уровень

Обозначим характерную энергию локализации в размере  $a$  через  $E_0 = \hbar^2/(2ma^2)$ . Рассмотрим прямоугольную потенциальную яму с  $-V \gg E_0$  и такую, что  $2a\sqrt{2m|V|/\hbar^2} = \pi n - \varepsilon$ , где  $\varepsilon \ll 1$  (при небольшом увеличении глубины такой ямы в ней появился бы ещё один уровень с очень близкой к нулю энергией).

Опишем поведение амплитуды прохождения вблизи первого максимума коэффициента прохождения с помощью (2.40). Положение первого максимума определяется условием  $2k_a = \pi n$ . Соответствующая энергия  $E_r = -|V| + E_0\pi^2 \ll E_0$ . В этом максимуме  $k/k_1 \ll 1$  и  $ka \ll 1$ . В окрестности этого максимума  $k_1 a = k_1^r a + (E - E_r)/(E_0\pi n)$ . Теперь простое разложение (2.40) вблизи максимума даёт

$$1 + if(k, k) \propto \frac{\Gamma/2}{E - E_r + i\Gamma/2}, \text{ где } \Gamma = 4(ka)E_0.$$

Нетрудно убедиться, что амплитуда волны внутри рассеивателя возрастает по сравнению с амплитудой падающей волны в  $k_1/k$  раз.

### 2.8.3. Особенности рассеяния волнового пакета

Рассмотрим сначала падающий пакет вдали от рассеивателя. Пусть в нашем пакете средняя энергия частиц  $E_0 = \hbar\omega_0$ , а разброс частот есть  $\Delta\omega \equiv \Delta E/\hbar$ . Зависимость энергии от импульса (закон дисперсии)  $E(p)$  мы будем считать достаточно гладкой. Если закон дисперсии линеен  $E = cp$  (свет, звук), то при движении в среде без потенциала такой пакет сохраняет свою форму. Если закон дисперсии нелинеен, например  $E = p^2/(2m)$  (электроны, ядра), то при движении в среде без потенциала такой пакет расплывается, см. обсуждение на стр. 19.

Наличие рассеивателя модифицирует волновой пакет, поскольку разные компоненты Фурье при прохождении области потенциала по-разному меняют свою амплитуду и фазу. Нетривиальные явления имеют место, если средняя энергия частиц пакета  $E_0$  находится в области, где коэффициент прохождения отдельных гармоник заметно меняется с изменением энергии. Важнейший пример такого рода представляют пакеты, отвечающие квазистационарным состояниям.

Если основной интервал энергий пакета располагается в стороне от резонансов, изменения в амплитудах и фазах разных гармоник при рассеянии различаются не очень сильно, в этом случае пакет модифицируется как целое — его амплитуда падает примерно в  $D(E_0)$  раз, а различие во временах задержки для разных Фурье-гармоник приводит к некоторому дополнительному расплыванию. Если средняя энергия  $E_0$  близка к значению, отвечающему максимуму или минимуму коэффициента прохождения, и величина  $\Delta E$  превышает энергетическую ширину этого максимума или минимума, в результате рассеяния форма пакета может сильно видоизмениться. Частный пример даёт обобщавшееся выше поведение пакета, отвечающего квазиуровню.

Волновой пакет, локализованный на рассеивателе, может охватывать два или более квазиуровней. Амплитуды сигналов для каждого из них велики, а времена жизни (ширины) различаются. В этом случае пакет покидает рассеиватель как набор разделённых во времени цугов, отвечающих каждому из квазиуровней по отдельности.

## § 2.9. Некоторые правила сумм

Большинство практических задач квантовой механики не решается точно. Нередко приходится использовать приближения, в которых волновая функция просто придумывается, а её параметры уточняются приближённым методом, например, вариационным (§ 5.2). С помощью правил сумм некоторые негодные варианты отсекаются сразу же. Более тонкая проверка основана на том, что *обычно* правила сумм «насыщаются» несколькими первыми слагаемыми с точностью 80–90 %.

- Рассмотрим величину  $R = 2m \sum_n (E_k - E_n) |\langle k|x|n \rangle|^2$ , 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, хотя при  $k = 0$  все слагаемые — одного знака, а при  $k \neq 0$  ряд включает слагаемые разных знаков. Действительно, запишем

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

Поясним последовательность равенств. Вначале мы просто вносим множитель  $E_k - E_n$  под знак матричного элемента, отдельно первого и второго (во втором случае мы дважды меняем знак). Затем мы замечаем, что действие оператора  $\hat{H}$  налево даёт  $E_k$ , а направо  $E_n$ , и в итоге  $\langle k | [\hat{H}, x] | n \rangle \equiv \langle k | \hat{H} x - x \hat{H} | n \rangle \equiv \langle k | (E_k - E_n) x | n \rangle$ . То же относится и ко второму слагаемому. В силу (3.8), мы имеем  $[\hat{H}, x] = -i\hbar \hat{p}/m$ . Затем с помощью условия полноты  $\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1}$  (1.16) выполняется суммирование по состояниям  $|n\rangle$ . Получившиеся в результате этого суммирования операторы собираются в коммутатор  $[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar$ . Его среднее значение по состоянию  $|k\rangle$  с учётом условия нормировки  $\langle k | k \rangle = 1$  даёт выписанный ответ

$$\sum_n (E_k - E_n) |\langle k | x | n \rangle|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}. \quad (2.53)$$

В варианте, когда под знаком суммы стоит матричный элемент (трёхмерного) дипольного момента  $e\mathbf{r}$ , правая часть умножается на  $3e^2$ . В таком виде это соотношение носит название *дипольного правила сумм Томаса-Райхе-Куна*.

• Построим ещё 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:

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

(Отметим, что второй коммутатор в первой строке этой цепочки преобразований отличается от первого знаком.) Результатом является среднее значение кинетической энергии, которую мы вычисляем по теореме о вириале (разд. 2.1.3). Согласно этой теореме, средние значения кинетической энергии осциллятора и кулоновской задачи равны соответственно  $\langle k|\hat{T}_{\text{кин}}^{\text{осц}}|k\rangle = E_k/2$ ,  $\langle k|\hat{T}_{\text{кин}}^{\text{кул}}|k\rangle = -E_k$ . Итак,

$$\sum_n (E_k - E_n)^2 |\langle k|x|n\rangle|^2 = \begin{cases} -2\hbar^2 E_k/m & \text{кулон,} \\ \hbar^2 E_k/m & \text{осциллятор.} \end{cases} \quad (2.54)$$

Значения энергий  $E_k$  для этих систем найдены в главах 4 и 9.

Следует заметить, что в суммы (2.53), (2.54) входят ВСЕ стационарные состояния гамильтониана, включая вклад непрерывного спектра, который следует записать в виде интеграла по энергиям. Если не учитывать вклад непрерывного спектра, эти правила сумм превращаются в неравенства.

## § 2.10. Задачи

1. Как изменится  $\psi(x, t)$  при замене  $V(x) \rightarrow V(x) + V_0$ .
2. Как изменится вид  $\psi(x, t)$  в системе отсчёта, движущейся относительно первоначальной со скоростью  $\mathbf{v}$ ?
3. Выполняется ли теорема о вириале для состояний непрерывного спектра?
4. Вычислить оператор  $e^{a\hat{P}}$ , где  $a$  — число, а  $\hat{P}$  — оператор отражения.
5. Как выглядят стационарные состояния с определённой чётностью в случае свободного движения (при  $V = 0$ )?
6. Вычислить плотность тока (2.4) для волнового пакета (1.41).
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)  $\psi(x) = \{Axe^{-\beta x}$  при  $x > 0$ ,  $0$  при  $x < 0\}$ .
9. Для частицы в потенциальной яме (2.19) покажите, что
  - а) всегда существует хотя бы один уровень;
  - б) чётные и нечётные уровни чередуются;

- в) для всех состояний  $A = \sqrt{\varkappa/(1 + \varkappa a)}$ ;  
 г) придумайте, как определить силу, действующую на стенку ямы, и найдите её;  
 д) покажите, что при  $N_0 \gg 1$  (2.22) (для глубокой ямы) уровни слабо отличаются от уровней бесконечно глубокой ямы. Для какого набора уровней  $E_n$  можно использовать результаты, полученные для бесконечно глубокой ямы с погрешностью меньше 10%?  
 е) При каких значениях глубины ямы один уровень выходит на границу непрерывного спектра ( $E = 0$ ).
10. а) Определить уровни энергии для потенциала

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

При каком значении  $V$  в яме появляется уровень? два уровня? Сравните решения с решениями для симметричной ямы (2.21с).

- б) Взаимодействие протона и нейтрона, приводящее к образованию дейтона, можно аппроксимировать прямоугольной потенциальной ямой с шириной 1,2 фм и глубиной  $U$ . Энергия связи дейтона — очень малая величина 2,2 МэВ. Найти  $U$ . Какой должна быть глубина ямы, чтобы дейтон не мог существовать?
11. Частица находится в поле  $U(x) = -G\delta(x)$ , разд. 2.6.2.
- а) Показать, что решение (2.25) получается из (2.21с) при  $K_0 a \rightarrow 0$ .  
 б) Для основного состояния вычислить разброс координат; найти средние значения кинетической и потенциальной энергий.  
 в) Построить полную систему состояний дискретного и непрерывного спектра.  
 г) В начальный момент волновая функция  $\psi(x, t = 0) = \varkappa^{-1/2} e^{-\varkappa|x|}$  (величина  $\varkappa$  не связана с  $G$ ). Найти вероятность того, что при  $t \rightarrow \infty$  частица окажется в связанном состоянии.
12. Частица в «движущейся яме»  $U(x, t) = -G\delta(x - vt)$  находится в связанном состоянии. В момент  $t = 0$  яма останавливается,  $U(x, t > 0) = -G\delta(x)$ . Найти вероятность того, что частица останется в связанном состоянии.
13. Пучок электронов с импульсом  $p_z$  проходит между двумя плоскостями кристалла конечной длины так, что взаимодействие с этими плоскостями имеет вид:  $U(x) = \{0 \forall (|x| < a), \infty \forall (|x| > a)\}$ . Найти угловое распределение электронов на выходе.

*Указание.* Связать угловое распределение с распределением электронов по  $p_x$ .

14. Рассмотреть частицу в поле  $U = -G\delta(x - b)$  на полубесконечной прямой  $x > 0$ .
- Найти уровни энергии и волновые функции.
  - 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  $U(x) = -G[\delta(x + b) + \delta(x - b)]$ ,  $G > 0$
- найти уровни энергии и волновые функции; исследовать зависимость от  $b$ , найти силы, действующие на каждую из ям в разных состояниях;
  - найти  $\psi(x, t)$ , если при  $t < 0$  между ямами была непроницаемая перегородка и частица находилась в стационарном связанном состоянии вблизи левой ямы;
  - исследовать зависимость коэффициента прохождения от энергии и от  $b$  при разных знаках  $G$ ; показать, что при значениях  $b$ , лишь ненамного 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. Для частицы в поле  $U(x) = -G_1\delta(x + a) - G_2\delta(x - a)$  (2.26) вычислить приближённо уровни при  $mG_i a/\hbar^2 \gg 1$  энергии и изобразить соответствующие волновые функции. При каком наибольшем значении  $a$  в системе остаётся только одно связанное состояние. Найти уровень энергии для случая  $G_1 = -G$ ,  $G_2 = 2G$ .
18. 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  $a \rightarrow \infty$ .

19. Для потенциала (2.35) описание рассеяния даётся формулами (2.36). Вычислить коэффициенты прохождения и отражения. Проверить закон сохранения потока частиц при рассеянии. Специально рассмотреть случаи  $E > V$  и  $V > E > 0$ . Рассмотреть предел  $\hbar \rightarrow 0$ . Найти время задержки при отражении волнового пакета.
20. Для частицы в поле  $U = \pm G\delta(x - b)$  на полубесконечной прямой  $x > 0$  при  $\frac{mGa}{\hbar^2} \gg 1$  найти положение, ширину и время жизни наинизшего квазистационарного уровня. Сравнить с результатами разд. 2.8.1.
21. Естественно ожидать, что при большой ширине барьера выражение для коэффициента отражения, получающийся из (2.40) должно совпадать с коэффициентом отражения от ступеньки (2.36). Прямое сравнение формул показывает, что это не так. Почему? Как надо изменить постановку задачи, чтобы независимость от положения далёкого конца ступеньки восстановилась?
22. Рассмотреть рассеяние на очень глубокой потенциальной яме с максимумом коэффициента прохождения при  $E = E_r$ , имеющим ширину  $\Gamma$ . *Определить время задержки* на такой яме для волнового пакета с  $\langle E \rangle \approx E_r$ ,  $\langle \Delta E \rangle \ll \Gamma$  (учесть существование квазистационарного состояния при  $E \approx E_r$ ).

## Глава 3

# Зависимость операторов от времени

### § 3.1. Оператор эволюции системы со временем. Функция Грина

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

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

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

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

Если гамильтониан не меняется со временем, то из (3.1b) получается выражение, сходное с оператором конечного сдвига (1.31):

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

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:

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

• Эволюцию волновой функции (2.3) можно описать и с помощью функции Грина  $\mathbf{G}$ , которая в сущности представляет собой запись оператора эволюции в координатном представлении:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) \psi(\mathbf{r}', 0) d^3\mathbf{r}' : G = \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (3.4a)$$

Функция Грина удовлетворяет уравнению с начальным условием

$$i\hbar\partial G/\partial t = \hat{H}G, \quad G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', 0) = \sum \psi_n(\mathbf{r})\psi_n^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.4b)$$

• 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  $\infty$ . Его называют **матрицей рассеяния**, или  **$S$ -матрицей** (Гайзенберг):

$$\hat{S} = \hat{U}(\infty, -\infty). \quad (3.5)$$

Исследование  $S$ -матрицы составляет важнейшую часть релятивистской квантовой теории. На первый взгляд, выделенная роль времени в определении (3.5) не позволяет перейти к релятивистски инвариантному описанию. Довольно простые процедуры позволяют устранить эту трудность.

### § 3.2. Гайзенберговская картина

Разбирая соотношение неопределённостей в § 1.9, 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 неопределённостей 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 параграфа.

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

$$\langle A(t) \rangle = \langle \psi(\mathbf{r}, 0) | \hat{A}_H(t) | \psi(\mathbf{r}, 0) \rangle, \quad \hat{A}_H(t) \equiv \hat{U}^{-1}(t, 0) \hat{A} \hat{U}(t, 0). \quad (3.6)$$

Далее в этой главе операторы и векторы состояния в гайзенберговской картине мы снабжаем индексом  $H$ , а в использовавшейся ранее (шредингеровской) — индексом  $S$ , причём  $|\psi_H\rangle = |\psi_S(t=0)\rangle$ . 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  $\hat{H}_H(t) = \hat{H} \equiv \hat{H}_S$ . Мы рассмотрим ниже именно этот случай.

В гайзенберговской картине вся зависимость от времени даётся эволюцией оператора со временем:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi_S | \hat{A} | \psi_S \rangle = i\hbar \left\langle \psi_H \left| \frac{d\hat{A}_H}{dt} \right| \psi_H \right\rangle.$$

Раскроем производную в левой части равенства:

$$i\hbar \left( \left\langle \frac{d\psi_S}{dt} \left| \hat{A} \right| \psi_S \right\rangle + \left\langle \psi_S \left| \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right| \psi_S \right\rangle + \left\langle \psi_S \left| \hat{A} \left| \frac{d\psi_S}{dt} \right\rangle \right\rangle \right).$$

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

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

Определяя ещё частную производную гайзенберговского 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 гайзенберговской картине*:

$$i\hbar d\hat{A}_H/dt = i\hbar \partial \hat{A}_H / \partial t + [\hat{A}_H, \hat{H}] \quad (3.7)$$

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.

• Из (3.7) в частности, легко получается, что для любого оператора, не зависящего от времени явно, его среднее значение по любому стационарному состоянию системы не зависит от времени.

• Вычисляя с помощью (3.7) производные от операторов координаты и импульса по времени, мы получим выражения, имеющие формально тот же вид, что и в классической механике (*теорема Эренфеста*):

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} &= \frac{[\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}]}{i\hbar} \equiv \frac{[\hat{\mathbf{r}}, \hat{p}^2]}{2mi\hbar} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}, \\ \frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} &= \frac{[\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}]}{i\hbar} \equiv \frac{[\hat{\mathbf{p}}, \hat{U}(r)]}{i\hbar} = -\nabla U(r); \\ \Rightarrow \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} &= \frac{d}{dt} \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} = \frac{1}{m} \frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = -\frac{\nabla U}{m}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Последнее соотношение представляет собой операторную форму второго закона Ньютона. Из этих соотношений видно, что законы классической механики выполняются для *средних значений квантовых физических величин*.

Сказанное не означает, что центры тяжести волновых пакетов всегда движутся по классическим траекториям. Это связано с тем, что — вообще говоря — среднее значение  $\langle \nabla U(\mathbf{r}) \rangle$  не совпадает со значением этого градиента в центре тяжести пакета  $\langle \mathbf{r} \rangle$ . (Такого отличия нет в поле осциллятора и в однородном поле, в этих и только в этих полях центры тяжести волновых пакетов движутся по классическим траекториям.)

Первое из уравнений (3.8) ясно показывает, что в квантовой теории классическое понятие траектории лишено смысла. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим коммутатор операторов положений частицы в близкие моменты времени  $[\hat{x}(t), \hat{x}(t + \tau)]$ . В силу малости  $\tau$ , второй из этих операторов можно записать в виде  $\hat{x}(t + \tau) = \hat{x}(t) + \tau \hat{d}x/dt \equiv \hat{x}(t) + \tau \hat{p}/m$ . Подставляя ответ в коммутатор и используя (1.26), найдём

$$[\hat{x}(t), \hat{x}(t + \tau)] = i\hbar\tau/m. \quad (3.9a)$$

Используя общее соотношение неопределённостей (1.32), получим соотношение неопределённостей для координат, измеренных в близкие моменты времени

$$\Delta x(t) \cdot \Delta x(t + \tau) \geq \hbar|\tau|/2m. \quad (3.9b)$$

Это означает, что понятие траектории можно определить только с точностью до разброса  $\sqrt{\hbar|\tau|/2m}$ .

• При известном виде потенциала  $U(r)$  интегрирование уравнений (3.8) 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 неопределённостей при не малых интервалах  $t' - t$  является уже простой задачей — см. пример в разд. 4.1.3.

### § 3.4. Сложные системы. Представление взаимодействия

В ряде задач, в том числе при описании строения твёрдого тела и взаимодействий элементарных частиц, используют *представление взаимодействия*, промежуточное между гайзенберговской и шредингеровской картинами. При его построении почти всегда явно или неявно используется *адиабатическое допущение Эренфеста*. *Имеется в виду, что в далеком прошлом взаимодействие отсутствовало, а затем оно включилось очень медленно — адиабатически.* (Такой подход фактически используется в § 5.3 и в гл. 16. Он используется явно в ряде книг при построении теории квантованных полей и элементарных частиц.)

Итак, 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 оператор эволюции вида (3.2), отвечающий *свободному* гамильтониану, через

$$\hat{U}_0 = e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}. \quad (3.11)$$

В представлении взаимодействия оператор физической величины  $A$  принимает вид  $\hat{A}_I$  ( $I$  — *interaction*):

$$\hat{A}_I(t) = \hat{U}_0^{-1}(t)\hat{A}\hat{U}_0(t). \quad (3.12)$$

Иными словами, в этом представлении зависимость операторов от времени определяется *свободным* гамильтонианом (3.12) (подобно тому, как это имело место для гайзенберговской картины), а за волновыми функциями сохраняется временная зависимость, обусловленная взаимодействием. Уравнение Шредингера в представлении взаимодействия в базисе свободного движения имеет вид (16.5).

Уравнение для оператора эволюции системы в представлении взаимодействия записывается в виде, сходном с (3.1),

$$i\hbar \frac{d\hat{U}_I(t)}{dt} = \hat{V}_I \hat{U}_I(t), \quad \hat{U}_I(t=0) = 1; \quad \hat{V}_I = \hat{U}_0^{-1} \hat{V} \hat{U}_0.$$

Он связан с полным оператором эволюции  $\hat{U}(t)$  (3.1) простым соотношением

$$\hat{U}_I(t) = \hat{U}_0^{-1}(t) \hat{U}(t). \quad (3.13)$$

Оператор эволюции  $\hat{U}_I(t)$ , вообще говоря, не удаётся записать в форме, подобной (3.2), поскольку операторы  $\hat{H}_0$  и  $\hat{V}(t)$  могут не коммутировать. Однако если взаимодействие  $V$  слабое, то с помощью оператора взаимодействия в представлении свободного гамильтониана (3.12) можно записать первые члены ряда для оператора эволюции в виде

$$\hat{U}_I(t, 0) \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{V}_I(t') dt' + \dots \quad (3.14)$$

### § 3.5. Задачи

1. Найти операторы координаты и импульса в зависимости от времени
  - а) для свободной частицы,
  - б) для частицы в однородном поле  $U(x) = -Fx$ ;
  - в) покажите, что для гармонического осциллятора ( $U(x) = m\omega^2 x^2/2$ ) получается решение (4.22).
2. 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.
3. Показать, что среднее значение оператора  $\hat{A}$ , не зависящего явно от времени, по стационарному состоянию гамильтониана также не зависит от времени. Использовать (3.7).

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  $d\hat{r}/dt$  и  $d^2\hat{r}/dt^2$ .
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 неопределённости в случаях: свободного движения, однородного поля и гармонического осциллятора. То же для произвольного поля  $U(x)$  при малых  $\tau = |t' - t|$ .
7. Найти перестановочное соотношение для операторов кинетической энергии осциллятора, взятых в разные моменты времени. Записать соответствующее соотношение неопределённости.

## Глава 4

# Гармонический осциллятор

Гармонический осциллятор — система с гамильтонианом

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

Это важнейший объект в квантовой механике и её приложениях. Многие свойства сложных систем можно понять, используя развитые ниже подходы.

Введём естественные в задаче единицы длины  $x_0$ , импульса  $p_0$  и энергии  $\hbar\omega$ :

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

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

### § 4.1. Одномерный осциллятор. Операторный метод

Определим новые операторы:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{x}}{x_0} + i \frac{\hat{p}}{p_0} \right) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right); \quad \left| \begin{array}{l} \hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} (\hat{a} + \hat{a}^+); \\ \hat{p} = \frac{ip_0}{\sqrt{2}} (\hat{a}^+ - \hat{a}). \end{array} \right. \Rightarrow \quad (4.3)$$

Операторы  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$  эрмитово сопряжены друг другу. Они неэрмитовы, т. е. не описывают какие-либо измеримые физические величины. Однако они дают в наши руки инструмент, полезный для разнообразных приложений и обобщений.

Нетрудно убедиться, что имеет место соотношение

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

С его учётом гамильтониан (4.2b) принимает вид<sup>1</sup>

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

Проверьте, что

$$[\hat{a}^+ \hat{a}, \hat{a}] = -\hat{a} \Rightarrow [\hat{\varepsilon}, \hat{a}] = -\hat{a}; \quad [\hat{a}^+ \hat{a}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+ \Rightarrow [\hat{\varepsilon}, \hat{a}^+] = \hat{a}^+. \quad (4.6)$$

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  $\hat{a}|n\rangle$ . Используя соотношения (4.6), получаем цепочку равенств

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

Точно так же получается, что  $\hat{\varepsilon}(\hat{a}^+|n\rangle) = (\varepsilon_n + 1)\hat{a}^+|n\rangle$ . Иными словами,

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

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

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

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

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

<sup>1</sup>В классической механике соотношения вида (4.3) определяют обобщённые координаты  $a$  и  $a^*$ , которые можно считать канонически сопряжёнными, в такой задаче  $\hbar$  — просто размерная величина, обозначаемая *так же, как* и квант действия.

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

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

Мы видим, что разница энергий соседних уровней одна и та же — говорят, что эти уровни *эквидистантны*. Наблюдение подобной эквидистантности для какой-нибудь физической системы обычно позволяет сделать вывод об осцилляторном характере взаимодействия, хотя бы в каких-то не очень очевидных переменных.

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

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

Это служит основой широко используемой интерпретации:

•  *$n$ -е состояние осциллятора содержит  $n$  тождественных частиц — «вibroнов» с энергией  $E = \hbar\omega$ . Оператор  $\hat{a}^+$  — оператор рождения вibрона, оператор  $\hat{a}$  — оператор уничтожения вibрона, оператор  $\hat{n} = \hat{a}^+\hat{a}$  есть оператор числа вibroнов<sup>1</sup>.*

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

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

• **Чётность состояний осциллятора.** Заметим, что гамильтониан осциллятора коммутирует с оператором отражения. Поэтому собственные состояния осциллятора обладают определённой чётностью.

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

Основное состояние  $|0\rangle$  чётно, а операторы  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$  меняют знак при отражении, т. е. нечётны. Поэтому состояние  $|n\rangle = (\hat{a}^+)^n|0\rangle/\sqrt{n!}$  имеет чётность  $(-1)^n$ ,

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

• **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. (1.22)). Для гамильтониана и операторов  $\hat{a}$ ,  $\hat{a}^+$  ответы выписаны в соотношениях (4.9), (4.11), которые принимают вид:

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

$$\hat{a}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \hat{a} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

◇ Чтобы найти вид операторов координаты и импульса в энергетическом представлении, выразим их через операторы  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$  (4.3), (4.13):

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

После этого получается

$$\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \hat{p} = \frac{ip_0}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

**Неопределённости 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  $\langle x^2 \rangle_n = x_0^2(n + 1/2)$ ,  $\langle p^2 \rangle_n = p_0^2(n + 1/2)$ . Это нетрудно получить и прямо из определений операторов  $\hat{a}$ , 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 получившиеся соотношения дают прямо значения неопределённостей в собственных состояниях

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

Иными словами, в  $n$ -м собственном состоянии осциллятора произведение  $\Delta x \Delta p$  в  $(2n + 1)$  раз больше наименьшего значения, отвечающего соотношению неопределённостей (1.32). (Возрастание  $\Delta x$  с ростом  $n$  иллюстрирует рис. 2.)

#### 4.1.1. Границы применимости

Для реальных физических задач потенциал (4.1) представляет собой приближение, справедливое в некоторой области  $|x| \lesssim a$ . При больших  $x$  рост потенциала останавливается, сменяясь другим поведением. Чтобы увидеть влияние этой остановки, мы рассмотрим случай, когда при  $|x| \gtrsim a$  взаимодействие исчезает, на примере точно решаемой задачи с потенциалом, который при  $x \ll a$  выглядит как осциллятор:

$$U = \frac{m\omega^2 x^2}{2} \left( \frac{a}{x} \operatorname{th}(x/a) \right)^2. \quad (4.17)$$

Волновые функции и уровни энергии для этой задачи  $E_n$  можно найти в [1] (задача к § 23, см. также [16], [17]):

$$E_n = \hbar\omega \left[ \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{1 + \beta^2} - \beta \left( n^2 + n + \frac{1}{2} \right) \right] \left( \beta = \frac{\hbar}{m\omega a^2} \right), \quad (4.18)$$

причём уровней с  $n > \sqrt{1 + \beta^2}/\beta - 1/2$  не существует.

Это означает, в частности, что для реальных физических систем осцилляторного типа утверждение об эквидистантности уровней справедливо лишь при не очень больших энергиях (небольших  $n$ ).

Параметром малости, определяющим «осцилляторность» системы, является величина  $\beta = (x_0/a)^2$ . При  $\beta \ll 1$  и небольших  $n$  уровни мало отличаются от уровней осциллятора. С ростом  $n$  расстояния между уровнями уменьшаются,

$$E_{n+1} - E_n \approx \hbar\omega(1 - 2\beta n) \approx \hbar\omega(1 - 2E_n/U_0).$$

Подобная картина сохраняется и для других «выползающих» потенциалов. Это подтверждает и расчёт с помощью теории возмущений, см. задачу 5.4.

#### 4.1.2. Оператор отражения координат любой системы

Рассмотрим оператор

$$\hat{\mathcal{P}} = \exp(i\pi\hat{a}^+\hat{a}) \equiv -i \exp\left[\frac{i\pi}{2}\left(\frac{x^2}{x_0^2} + x_0^2\frac{d^2}{dx^2}\right)\right]. \quad (4.19a)$$

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

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

Набор волновых функций осциллятора является полным, т. е. для любой волновой функции можно записать  $\psi(x) = \sum c_n\psi_n(x)$ . Поэтому  $\hat{\mathcal{P}}$  представляет собой явную форму оператора отражения координаты<sup>1</sup>, а  $\hat{\mathcal{P}}_{\pm} = (1 \pm \hat{\mathcal{P}})/2$  — операторы проектирования на чётную и нечётную часть любой функции:

$$\hat{\mathcal{P}}\psi(x) = \psi(-x), \quad \hat{\mathcal{P}}_{\pm} = \frac{1 \pm \hat{\mathcal{P}}}{2}, \quad \hat{\mathcal{P}}_{\pm}\psi(x) = \frac{\psi(x) \pm \psi(-x)}{2}. \quad (4.19b)$$

Теперь можно забыть о связи нашего определения с конкретным осциллятором и использовать вторую форму (4.19a), в которой масштаб  $x_0$  выбирается из соображений удобства для каждой конкретной задачи с состояниями, принадлежащими Гильбертову пространству  $L_2$ .

<sup>1</sup>В частности, оператор  $\hat{\mathcal{P}}^2 \equiv e^{2i\pi\hat{a}^+\hat{a}}$  эквивалентен единичному.

◇ В трёхмерном случае оператор отражения координат имеет вид (4.19) с заменой  $\hat{a}^+\hat{a}$  на сумму произведений таких операторов по всем трём осям,

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

### 4.1.3. Зависимость операторов от времени

Уравнения для эволюции операторов рождения и уничтожения со временем (3.7) легко получаются с помощью перестановочных соотношений (4.6).

$$\frac{d\hat{a}}{dt} = -i\omega\hat{a}, \quad \frac{d\hat{a}^+}{dt} = i\omega\hat{a}^+. \quad (4.20)$$

Их решение имеет вид

$$\hat{a}(t) = \hat{a}(0)e^{-i\omega t}, \quad \hat{a}^+(t) = \hat{a}^+(0)e^{-i\omega t}. \quad (4.21)$$

Соотношения (4.14) позволяют выразить значения координат и импульсов в данный момент времени через соответствующие операторы рождения и уничтожения. Подстановка этих соотношений в (4.21) показывает, что операторы  $\hat{x}_H(t)$  и  $\hat{p}_H(t)$  выражаются через их начальные значения  $\hat{x}(0)$  и  $\hat{p}(0)$  соотношениями, имеющими точно такой же вид, как и в механике, с заменой переменных  $x$  и  $p$  на операторы:

$$\begin{aligned} \hat{x}_H(t) &= \hat{x}(0) \cos(\omega t) + \hat{p}(0) \sin(\omega t)/(m\omega), \\ \hat{p}_H(t) &= \hat{p}(0) \cos(\omega t) - m\omega\hat{x}(0) \sin(\omega t). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Эти соотношения можно получить и прямо из уравнений эволюции операторов координаты и импульса (3.8), которые для нашей задачи имеют вид  $d\hat{x}/dt = p/m$ ,  $d\hat{p}/dt = -m\omega^2\hat{x}$ , т. е. выглядят так же, как соответствующие уравнения в механике. Поскольку эти уравнения линейны, то и их решения выглядят так же, как в механике, (4.22).

Обсудим теперь некоторые следствия уравнений (4.22).

Во-первых, усреднение по любому состоянию показывает, что средние значения координат и импульса осциллятора эволюционируют точно так же, как соответствующие классические величины.

Во-вторых, теперь уже нетрудно получить, например, коммутатор координат в разные моменты времени и соответствующее соотношение неопределённостей

$$[\hat{x}(t), \hat{x}(t+\tau)] = i\hbar \sin(\omega\tau)/(m\omega) \Rightarrow \Delta x(t)\Delta x(t+\tau) \geq \frac{\hbar |\sin(\omega\tau)|}{2m\omega}. \quad (4.23)$$

## § 4.2. Координатное представление

### 4.2.1. Применение операторного метода

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)

$$\psi_0(\xi) = \pi^{-1/4} e^{-\xi^2/2} \Rightarrow \psi_0(x) = \pi^{-1/4} x_0^{-1/2} e^{-x^2/2x_0^2}. \quad (4.24)$$

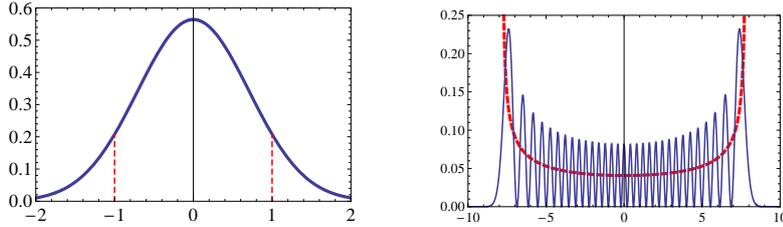


Рис. 2. Квадраты волновых функций (плотности вероятности) состояний с  $n = 0$  (слева) и  $n = 30$  (справа). Пунктиром справа показана соответствующая классическая плотность вероятности при той же энергии

Соответственно

$$\begin{aligned} \psi_n(\xi) &= \frac{\hat{a}^+ \psi_{n-1}}{\sqrt{n}} = \frac{1}{\sqrt{2n}} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right) \psi_{n-1} \equiv -\frac{e^{\xi^2/2}}{\sqrt{2n}} \frac{d}{d\xi} \left( e^{-\xi^2/2} \psi_{n-1} \right) \\ \Rightarrow \psi_n(\xi) &= \pi^{-1/4} \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!}} e^{\xi^2/2} \left( \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2} \equiv \frac{\pi^{-1/4} e^{-\xi^2/2}}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Последнее равенство можно интерпретировать как определение *полиномов Эрмита*  $H_n(\xi)$ , выражения для которых можно найти в таблицах. 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. 2 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 чётным значением  $n$  — чётные, а для нечётных  $n$  они нечётные.

#### 4.2.2. Решение дифференциального уравнения

Почувительно разобрать, как полученные выше решения получают прямым решением дифференциального уравнения Шредингера для осциллятора. Для этого запишем это уравнение в безразмерных переменных (4.2):

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

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 (2.17) выбирают знак *минус* в показателе экспоненты.

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  $\xi$ . 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 (2.17), 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 (4.25), коэффициенты входящих сюда *полиномов Эрмита* связаны приведёнными выше рекуррентными соотношениями.

### § 4.3. Двумерный осциллятор

Гамильтониан двумерного осциллятора со связью между колебаниями по разным осям запишем в виде

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + \frac{m\omega_1^2 x_1^2}{2} + bm x_1 x_2 + \frac{m\omega_2^2 x_2^2}{2}. \quad (4.26)$$

Чтобы преобразовать эту систему в сумму двух независимых осцилляторов, достаточно диагонализировать потенциальную энергию при сохранении диагональной формы кинетической энергии (поворот на некий угол  $\theta$ , далее  $c = \cos \theta$ ,  $s = \sin \theta$ )

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \hat{F} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix} = \hat{F} \begin{pmatrix} p_{z1} \\ p_{z2} \end{pmatrix}, \quad \text{где } \hat{F} = \begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix}. \quad (4.27)$$

«Новые» импульсы и координаты удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и «старые»<sup>1</sup>,  $[\hat{p}_{zk}, z_\ell] = -i\hbar\delta_{k\ell}$ .

При  $\operatorname{tg} 2\theta = 2b/(\omega_2^2 - \omega_1^2)$  гамильтониан приобретает вид суммы двух невзаимодействующих осцилляторов:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_{z1}^2}{2m} + \frac{m\Omega_1^2 z_1^2}{2} + \frac{\hat{p}_{z2}^2}{2m} + \frac{m\Omega_2^2 z_2^2}{2}, \quad (4.28)$$

$$\Omega_{1,2}^2 = \frac{\omega_1^2 + \omega_2^2 \pm \sqrt{(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2 + 4b^2}}{2}.$$

Квадраты частот колебаний  $\Omega_i^2$  — собственные числа матрицы  $\begin{pmatrix} \omega_1^2 & b \\ b & \omega_2^2 \end{pmatrix}$ .

Если  $|b| > \omega_1\omega_2$ , частота  $\Omega_2$  получается мнимой, система неустойчива.

Для каждого из получившихся осцилляторов операторы уничтожения и рождения  $\hat{a}_{kz}$  и  $\hat{a}_{kz}^+$  (4.3) строятся стандартным образом, в терминах величин  $\hat{p}_i \equiv -\hbar d/dx_i$  и  $x_i$ , входящих в исходный гамильтониан (4.26), они имеют вид

$$\hat{a}_{1z} = \frac{m\Omega_1}{\sqrt{2\hbar}} \left[ x_1 c + x_2 s + \frac{\hbar}{m\Omega_1} \left( c \frac{d}{dx_1} + s \frac{d}{dx_2} \right) \right], \quad (4.29)$$

$$\hat{a}_{2z} = \frac{m\Omega_2}{\sqrt{2\hbar}} \left[ -x_1 s + x_2 c + \frac{\hbar}{m\Omega_2} \left( -s \frac{d}{dx_1} + c \frac{d}{dx_2} \right) \right]; \quad \hat{a}_{kz}^+ \equiv (\hat{a}_{kz})^+.$$

<sup>1</sup>Случай неравных масс  $\hat{p}_k^2/2m \rightarrow \hat{p}_k^2/2m_k$ ,  $bm \rightarrow b\sqrt{m_1 m_2}$  сводится к рассмотренному в тексте заменой переменных  $x_k = y_k/\sqrt{m_k}$ ,  $\hat{p}_k = \hat{p}_{yk}\sqrt{m_k}$  ( $k = 1, 2$ ).

С помощью этих операторов гамильтониан и уровни энергии записываются в виде

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hbar\Omega_1(\hat{a}_{1z}^+ \hat{a}_{1z} + 1/2) + \hbar\Omega_2(\hat{a}_{2z}^+ \hat{a}_{2z} + 1/2); \\ E_{n_1 n_2} &= \hbar\Omega_1(n_1 + 1/2) + \hbar\Omega_2(n_2 + 1/2).\end{aligned}\quad (4.30)$$

Волновые функции

$$\begin{aligned}\psi_{n_1 n_2} &= \psi_{n_1}(z_1/z_{10})\psi_{n_2}(z_2/z_{20}) = \frac{1}{\sqrt{n_1!n_2!}} \hat{a}_{1z}^{+n_1} \hat{a}_{2z}^{+n_2} \psi_{00}(z_1, z_2); \\ \psi_{00}(z_1, z_2) &= \psi_0(z_1/z_{10})\psi_0(z_2/z_{20}) \quad \left(z_{k0} = \sqrt{\hbar/m\Omega_k}\right).\end{aligned}\quad (4.31)$$

Подстановка сюда (4.29) и выражений (4.24) для функций  $\psi_0$  даёт выражения этих функций через первоначальные координаты  $x_1$  и  $x_2$ .

При некоторых значениях параметров уровни становятся вырожденными, система обладает симметрией, которая может быть не замечена в исходном гамильтониане (4.26) (*скрытая симметрия*).

• **Двумерный симметричный осциллятор.** При  $b = 0$ ,  $\omega_1 = \omega_2 = \omega$  система обладает явной симметрией относительно вращений в плоскости  $(x_1, x_2) \equiv (z_1, z_2)$ . В терминах операторов рождения и уничтожения гамильтониан принимает форму  $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_1^+ \hat{a}_1 + \hat{a}_2^+ \hat{a}_2 + 1)$ . Соответствующие значения энергии

$$E_n = \hbar\omega(n + 1), \quad \text{где } n = n_1 + n_2, \quad (4.32)$$

вырождены  $(n + 1)$ -кратно (одно и то же  $n$  получается при  $n_1 = 0$ ,  $n_2 = n$ , при  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = n - 1$ , при  $n_1 = 2$ ,  $n_2 = n - 2$  и т. д.). В силу (2.11) это означает, что существует по крайней мере два различных оператора, коммутирующих с гамильтонианом и не коммутирующих друг с другом.

В нашем случае можно выбрать в качестве таких операторов

$$A_2^{(1)} = \hat{a}_1^+ \hat{a}_2 \quad \text{и} \quad A_1^{(2)} = \hat{a}_2^+ \hat{a}_1. \quad (4.33)$$

Легко проверить, что эти операторы перестановочны с гамильтонианом, но мы воспользуемся другим поучительным приемом. Пусть  $|n_1, n_2\rangle$  — собственное состояние нашего осциллятора с заданными значениями  $n_1$  и  $n_2$ . Тогда

$$\begin{aligned}A_2^{(1)}|n_1, n_2\rangle &= \sqrt{(n_1 + 1)n_2}|n_1 + 1, n_2 - 1\rangle, \\ A_1^{(2)}|n_1, n_2\rangle &= \sqrt{(n_2 + 1)n_1}|n_1 - 1, n_2 + 1\rangle.\end{aligned}$$

Таким образом, действие операторов (4.33) на собственное состояние  $|n_1, n_2\rangle$  сохраняет сумму  $n_1 + n_2 = n$ , т. е. и энергию, и значит, эти операторы коммутируют с гамильтонианом.

Геометрический смысл этой симметрии станет более прозрачным, если перейти от (4.33) к другой паре операторов, оператору проекции момента импульса на ось  $z$ , который прямо получается из (4.3), и оператору  $\hat{B}$ :

$$\begin{aligned}\hat{L}_z = x\hat{p}_2 - y\hat{p}_1 &= -i\hbar(A_2^{(1)} - A_1^{(2)}) \equiv -i\hbar(\hat{a}^+_1\hat{a}_2 - \hat{a}^+_2\hat{a}_1), \\ \hat{B} &= \hat{a}^+_1\hat{a}_2 + \hat{a}^+_2\hat{a}_1.\end{aligned}\tag{4.34}$$

Нетрудно убедиться, что эти операторы не коммутируют между собой:

$$[A_2^{(1)}, A_1^{(2)}] = -(\hat{a}^+_1\hat{a}_1 + \hat{a}^+_2\hat{a}_2), \quad [\hat{L}_z, \hat{B}] = 2i\hbar(\hat{a}^+_1\hat{a}_1 + \hat{a}^+_2\hat{a}_2).$$

• Менее тривиальный пример скрытой симметрии с вырождением  $\Omega_1 = 2\Omega_2$  возникает при  $3(\omega_1^2 + \omega_2^2) = 5\sqrt{(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2 + b^2}$ . Спектр энергий можно записать в виде  $\hbar\Omega_2(N + 3/2)$ , где  $N = 2n_1 + n_2$  и кратность вырождения равна  $n + 1$  при  $N = 2n$  и при  $N = 2n + 1$ . Нетрудно построить дополнительные сохраняющиеся операторы по образцу (4.33), это  $\hat{B}_1^{(2)} = \hat{a}_2^{+2}\hat{a}_1$  и  $\hat{B}_2^{(1)} = \hat{a}_1^+\hat{a}_2^2$ . Описание соответствующей геометрической симметрии предоставляется читателю.

#### § 4.4. «Нулевые колебания» осциллятора и возможности их наблюдения

На первый взгляд, слагаемое  $\hbar\omega/2$  в энергии осциллятора (4.9) не имеет серьёзного смысла, поскольку оно может быть устранено простым сдвигом начала отсчёта энергии («перенормировка энергии»). Во многих случаях такой подход оправдан. Однако существуют физические явления, в которых «нулевые колебания» осциллятора приводят к наблюдаемым эффектам. Мы обсудим два таких эффекта — размазку пятен, возникающих при дифракции рентгеновских лучей на кристалле, и эффект Казимира («давление вакуума») — давление на металлическую пластинку, обусловленное разностью энергий *электромагнитного поля* с двух её сторон. Оба этих эффекта наблюдаются при низких температурах.

• **Дифракция на кристалле.** Условия дифракции рентгеновских лучей или нейтронов на трёхмерном идеальном кристалле приводят к тому, что дифракционная картина представляет собой набор точек (дифракция Вульфа–Брэгга, см. [21], [22]). При конечной температуре 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 решётки (см. § 7.8), 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.

Для одного осциллятора с частотой  $\omega$  амплитуда нулевых колебаний имеет вид (4.16)  $\sqrt{\langle x^2 \rangle_0} = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ . В кристалле каждый ион участвует в разнообразных колебаниях решётки (см. ниже, § 7.8) со спектром (плотностью числа колебаний на единицу интервала частот)  $\rho(\omega)$ . В квадрате смещения иона от положения равновесия вклады всех этих колебаний складываются так, что

$$\langle x^2 \rangle_0 \propto \int \frac{\hbar}{m\omega} \rho(\omega) d\omega. \quad (4.35)$$

(Интеграл сходится, поскольку обычно при малых  $\omega$  имеем  $\rho(\omega) \propto \omega^2$  и спектр возможных частот колебаний в кристалле ограничен сверху.) Эта величина и определяет размер рентгеновских бликов при нулевой температуре — ещё один источник сведений о спектре колебаний данного кристалла.

При конечной температуре  $T$  учёт вкладов с  $n \neq 0$  (с Планковским распределением) добавляет под интеграл множитель  $\text{cth}(\hbar\omega/(2kT))$ . Получившаяся величина определяет значение *фактора Дебая–Валлера* — см. (7.56), она же входит в выражение для коэффициента линейного расширения (5.15b).

• **Давление вакуума (силы Казимира).** Электромагнитные колебания в объёмных резонаторах можно представить себе как набор

осцилляторов с длинами волн, отвечающими целому числу полуволен по каждому из направлений. Энергия каждого из этих осцилляторов не меньше, чем  $\hbar\omega/2$  (см. подробнее §14.2). 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 расчётах 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 ограничено, 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.*

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

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

Возможные значения компонент волнового вектора определяются требованием конечного числа полуволен  $s_i$  в каждом направлении. Соответственно, частоты колебаний поля между пластинами выражаются через значения волнового вектора,  $\omega_\alpha = ck_\alpha \equiv c\sqrt{k_\perp^2 + k_z^2}$ . Поперечная компонента  $\mathbf{k}_\perp = (\pi s_x/X, \pi s_y/Y)$  принимает одинаковые значения в обеих областях 12 и 23, а возможные значения продольных компонент различны,  $k_z = \pi s_z/\ell$  в области 12 и  $k_z = \pi s_z/L$  в области 23. 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 г.*

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

$$E_0 = \sum_{s_i, \lambda} \hbar \omega_i / 2 \quad (s_i \equiv s_x, s_y, s_z - \text{целые числа}) \quad (4.36a)$$

играет роль термодинамической внутренней энергии излучения. Здесь  $\lambda$  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

$$P = P^{(23)} - P^{(12)}, \quad \text{где, например,} \quad (4.36b)$$

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

В действительности при очень высоких частотах металл становится прозрачным, поля с обеих сторон пластины одинаковы, они «не замечают» пластину, не действуют на неё. Чтобы описать это изменение, введем в описание давления излучения *регуляризующий множитель (регулятор)  $R(\omega)$* , который ничего не портит при небольших частотах и убивает эффект при больших частотах (*это обычный прием при работе с «расходящимися» величинами*):

$$R(\omega) = \begin{cases} 1 & \text{при } \omega = 0, \\ 0 & \text{при } \omega \rightarrow \infty, \end{cases} \quad R'(0) \sim \beta, \quad R^{(n)}(0) \sim \beta^n, \quad \beta \rightarrow 0. \quad (4.37)$$

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

Перейдём к вычислению сумм (4.36) для области 12. Заменяем суммирование по поперечным движениям на интегрирование и выполним интегрирование по углам в поперечной плоскости:

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

(Мы учли, что интегрирование по углам в плоскости  $k_x, k_y$  даёт только  $\pi/2$ , поскольку  $s_x > 0$  и  $s_y > 0$ ). С учётом суммирования по поляризациям это даёт

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

Входящую в каждое слагаемое (4.36b) производную  $\partial\omega/\partial\ell$  удобно записать в виде  $\partial\omega/\partial\ell = -(1/\omega\ell)(\pi cs/\ell)^2$ . Теперь давление, производимое полем нулевых колебаний из области 12 на пластину 2, принимает вид

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

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

$$P^{(12)} = \frac{\hbar}{2\pi\ell c^2} \sum_s f(s) \equiv \frac{\hbar}{2\pi^2 c^3} \sum_s f(s) \left(\frac{du}{ds}\right), \quad (4.38a)$$

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

Чтобы найти полученную сумму, удобно использовать формулу Эйлера–Маклорена (В.14), применяемую при численном интегрировании:

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

Выразим отсюда сумму ряда через интеграл и производные  $f(s)$  в нуле. Учитывая, что

$$f(0) = 0, \quad f'(0) = 0, \quad f^{(3)}(0) = -6(c\pi/\ell)^3 R(0) \equiv -6(c\pi/\ell)^3,$$

а все последующие производные пропорциональны дополнительным степеням  $\beta$ , найдем

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

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

В этих выражениях от бесконечной энергии нулевых колебаний неограниченного пространства остался лишь конечный вклад  $\int_0^{\infty} f(\omega) d\omega$  (конечность — «приз» за регуляризацию). Этот вклад одинаков с обеих сторон пластины. Поэтому в *давлении вакуума* на вторую пластину  $\Delta P = P^{(23)} - P^{(12)}$  эти «бывшие бесконечности» сокращаются, и в пределе  $\beta \rightarrow 0$  при  $L \gg \ell$  мы получаем

$$\Delta P = \frac{\pi^2 \hbar c}{240 \ell^4}. \quad (4.38b)$$

Измерения при такой температуре  $T \ll \hbar c / \ell$ , что вертикальные колебания поля между пластинами 1 и 2 не возбуждаются, подтвердили этот результат. При  $\ell \sim 1$  мкм была достигнута точность около 5%.

## § 4.5. 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.  $\Delta x = \Delta y = a$ . 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 объём 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. В таких разных технических задачах, как прожигание отверстий лазерным лучом и создание фотонного коллайдера, желательно иметь как можно большие значения этого расстояния.

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

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

Итак, область фокусирования имеет наибольшую протяжённость, если достигается низший предел в соотношении неопределённостей  $A = 1$  (для света — 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, неодимовый лазер) и при  $a = 0,3$  мкм в дифракционном пределе величина  $\beta \approx 1$  мм. Если же мы имеем дело с  $n$ -м возбуждённым состоянием осциллятора электромагнитного поля, то в силу (4.16)  $A = 2n + 1$ , длина области фокусирования  $\beta$  уменьшается в  $(2n + 1)$  раз, и при больших энергиях вспышки эта длина 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 неопределённостей  $\Delta x \Delta p$  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 Э. Шредингером в 1926 г. Это — собственные состояния оператора уничтожения  $\hat{a}$ , определяемые уравнением

$$\hat{a}|\beta\rangle = \frac{\beta}{\sqrt{2}}|\beta\rangle, \quad \beta = \frac{Q}{x_0} + i\frac{P}{p_0}. \quad (4.39)$$

Здесь  $\beta$  — некоторое комплексное число, а  $Q$  и  $P$  пропорциональны его действительной и мнимой частям (*в этой задаче нет дополнительных условий, которые вели бы к запрету некоторых значений  $\beta$  — «квантованию»  $\beta$* ).

Решение уравнения (4.39) в координатном представлении получается из решения (4.24) для основного состояния простым сдвигом

$\xi \rightarrow \xi - \beta$  (с изменением нормировки из-за комплексности  $\beta$ ), т. е.  $\psi(\xi) = \pi^{-1/4} \exp\{-(\xi - \beta)^2 + (\text{Im } \beta)^2/2\}$ . В переменных  $x$  эта волновая функция имеет вид

$$\begin{aligned} \psi_\beta(x) &= \frac{1}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{x_0}} \exp \left[ -\frac{(x - Q - iP/m\omega)^2}{2x_0^2} - \frac{P^2}{2p_0^2} \right] \equiv \\ &\equiv \pi^{-1/4} x_0^{-1/2} e^{-(x-Q)^2/2x_0^2 - iP(x-Q)/\hbar}. \end{aligned} \quad (4.40)$$

В импульсном представлении волновая функция этого состояния имеет схожий вид.

Первая форма этой волновой функции показывает, что значения дисперсий  $\Delta x$  и  $\Delta p$  точно те же, что и для основного состояния и их произведение минимально, как и для основного состояния. т. е. когерентное состояние обеспечивает оптимальное фокусирование:

$$\Delta x = \frac{x_0}{\sqrt{2}}, \quad \Delta p = \frac{p_0}{\sqrt{2}} \Rightarrow \Delta x \Delta p = \hbar/2. \quad (4.41a)$$

Вторая форма волновой функции (4.40) показывает, что когерентное состояние — волновой пакет с центром в точке  $Q$  и суммарным импульсом  $P$ . При этом

$$\langle x^2 \rangle = \langle x \rangle^2 + \Delta x^2 \equiv Q^2 + \Delta x^2, \quad \langle p^2 \rangle = \langle p \rangle^2 + \Delta p^2 \equiv P^2 + \Delta p^2. \quad (4.41b)$$

В частности, именно так описывается состояние иона в кристаллической решётке после мгновенного (с точки зрения атомных явлений) испускания ядром фотона большой энергии  $E_\gamma$ . В этом случае  $Q = 0$  (атом не успел сдвинуться), а  $P = E_\gamma/c$  (см. подробнее в § 7.10).

В когерентном состоянии средние значения координаты и импульса не могут оставаться постоянными, поскольку входящие в их определения стационарные состояния по-разному меняются со временем. Описание этой эволюции получается с помощью гайзенберговского уравнения движения для оператора рождения  $\hat{a}(t)$ , разд. 4.1.3. В соответствии с теоремой Эренфеста, стр. 101, центр тяжести нашего волнового пакета движется так же, как классическая частица (4.22):

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

Соотношения (4.41) позволяют легко вычислить энергию соответствующего состояния

$$\begin{aligned} E = \langle \hat{H} \rangle &= \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} + \frac{m\omega^2 \langle x^2 \rangle}{2} = \frac{P^2 + \Delta p^2}{2m} + \frac{m\omega^2(Q^2 + \Delta x^2)}{2} = \\ &= \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2 Q^2}{2} + \frac{\hbar\omega}{2} \equiv \hbar\omega \frac{|\beta|^2 + 1}{2}. \end{aligned} \quad (4.42)$$

Итак, 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 определёнными амплитудами и фазами, обеспечивающими компенсацию разбросов координат и импульсов возбуждённых 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 (4.39) слева на  $\langle n|$ . Поскольку  $\langle n|\hat{a} = \sqrt{n+1}\langle n+1|$  (4.11), то с учётом ортогональности состояний с разными  $n$  получается рекуррентное соотношение  $\sqrt{n+1}d_{n+1} = \beta d_n/\sqrt{2}$ . Повторяя это соотношение  $n$  раз, начиная с  $n = 0$ , найдем

$$d_n \equiv \langle n|\beta\rangle = \frac{\beta^n}{\sqrt{2^n n!}} d_0 \Rightarrow |\beta\rangle = e^{-|\beta|^2/4} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{\sqrt{2^n n!}} |n\rangle. \quad (4.43)$$

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

$$|\beta\rangle = e^{-|\beta|^2/4} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\beta\hat{a}^+)^n}{2^{n/2} n!} |0\rangle \equiv e^{-|\beta|^2/4} e^{(\beta\hat{a}^+/\sqrt{2})} |0\rangle. \quad (4.44)$$

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

$$w_n = \frac{|\beta|^{2n}}{2^n n!} e^{-|\beta|^2/2}. \quad (4.45)$$

Среднее значение числа «вирбронов» в этом состоянии есть  $|\beta|^2/2$ , а средняя энергия осциллятора естественно совпадает с (4.42):

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

◇ Другой вывод уравнений для эволюции средних значений координаты и времени (4.22) основан на законе эволюции состояния  $|n\rangle$ , который имеет вид  $|n\rangle e^{-iE_n t/\hbar} \equiv |n\rangle e^{-it\omega n - it\omega/2}$ . В итоге

$$e^{|\beta|^2/2} |\beta(t)\rangle = \sum_n \frac{\beta^n e^{-i\omega n t - i\omega t/2}}{\sqrt{2^n n!}} |n\rangle \equiv e^{-i\omega t/2} \sum_n \frac{(\beta e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{2^n n!}} |n\rangle. \quad (4.46)$$

Итак, эволюция состояния со временем описывается заменой  $\beta \rightarrow \beta(t) = \beta e^{-i\omega t}$  — в точном соотношении с уравнением для гайзенберговского оператора  $\hat{a}(t)$  (4.21). Вспоминая теперь связь  $\beta(t)$  с координатой центра тяжести и импульсом пакета (4.39), вновь убедимся в справедливости (4.22).

◇ *Докажите*, что для когерентных состояний имеет место соотношение

$$\frac{1}{\pi} \int d(\operatorname{Re} \beta) d(\operatorname{Im} \beta) |\beta\rangle \langle \beta| = \hat{1}. \quad (4.47)$$

Это означает, что единичный оператор строится из комбинации проекторов на когерентные состояния, т. е. набор векторов когерентных состояний является полным (даже избыточным)

## § 4.6. Задачи

1. Найти волновые функции осциллятора в импульсном представлении.
2. Сравнить классическую  $dw/dx$  и квантовую  $|\psi_n(x)|^2$  плотности вероятности для осциллятора при  $n = 0$  и  $n \gg 1$ . Найти вероятность того, что в основном состоянии состояние осциллятора сосредоточено в ограниченной области изменения координат и импульса имеет  $|x| \ll \ell$ ,  $|p| \ll k$ .
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 средние значения операторов  $\hat{x}\hat{p}$ ,  $\hat{x}^4$ ,  $\hat{p}^4$  в  $n$ -ом состоянии осциллятора.
6. Найти перестановочные соотношения операторов кинетической энергии гармонического осциллятора, взятых в разные моменты времени. Записать соответствующее соотношение неопределённостей. Разобрать случаи собственных состояний осциллятора и их суперпозиции.
7. Найти уровни энергии и волновые функции для частицы в поле

$$U(x) = \begin{cases} m\omega^2 x^2/2 & \text{при } x > 0, \\ \infty & \text{при } x < 0. \end{cases} \quad (4.48)$$

Найти средние значения координаты и импульса и их дисперсию в каждом из состояний.

8. Частица находится в основном состоянии в поле (4.48). 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 качественно эволюцию получившегося состояния со временем.
9. Частица находится в поле  $U = m\omega^2 x^2/2$  в состоянии, описываемом волновой функцией

$$\psi(x) = \begin{cases} a) \pi^{-1/4} b^{-1/2} e^{-x^2/(2b^2)}; \\ b) \sqrt{2a^3}/[(x^2 + a^2)\sqrt{\pi}] \end{cases}$$

В каждом из случаев описать приближённо эволюцию состояния со временем. Определить вероятности того, что при измерении энергии будут найдены значения  $\hbar\omega/2$ ,  $3\hbar\omega/2$ ,  $5\hbar\omega/2$ . Найти среднее значение координаты  $\langle x(t) \rangle$  в зависимости от времени.

10. Докажите, что  $[\hat{a}, f(\hat{a}^+)] = df(\hat{a}^+)/d\hat{a}^+$  и в частности  $[\hat{a}, (\hat{a}^+)^n] = n(\hat{a}^+)^{n-1}$ . Вычислите  $[\hat{a}^2, (\hat{a}^+)^n]$ .
11. Найти перестановочные соотношения для операторов  $\hat{R}_1 = (\hat{a}^+\hat{a}^+ + \hat{a}\hat{a})/4$ ,  $\hat{R}_2 = (\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+)/4$ ,  $\hat{R}_3 = i(\hat{a}^+\hat{a}^+ - \hat{a}\hat{a})/4$ .
12. Найти собственные значения и собственные векторы операторов (4.34).
13. Построить волновую функцию когерентного состояния  $|\beta\rangle$  в импульсном представлении.
14. Найти собственные значения оператора  $\hat{a}^+\hat{a} + \lambda\hat{a}^+ + \lambda^*\hat{a}$ .

## Глава 5

# Методы приближений. I

### § 5.1. О приближённых методах квантовой механики

В отличие от изучавшихся выше примеров, большинство реальных задач квантовой механики не имеет точного аналитического решения. При известном потенциале существующие методы приближённого решения линейных дифференциальных уравнений позволяют отыскивать численное решение уравнения Шредингера с высокой точностью. Простейший пример такого рода даёт аппроксимация потенциала набором ступенек (кусочно постоянный потенциал рис. 1). Качество приближения определяется числом используемых ступенек и их размером. Однако уже небольшое изменение потенциала требует нового решения, и качественная картина явлений остаётся недостаточно ясной.

Во многих случаях представляется важным найти решение с приемлемой погрешностью, получить предварительные оценки до детального решения, исследовать изменение картины при изменении каких-то параметров взаимодействия, описать предельные ситуации и т. п. Этой цели служат общие методы приближённого решения таких задач, обсуждаемые в этой и последующей главах.

Идея этих 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 подходом к выбору 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 результатов. В других случаях следующие приближения по существу сложнее

первых, иногда регулярный метод для построения последующих приближений даже трудно предложить.

## § 5.2. 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  $\sum |a_n|^2 = 1$ . Образум 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 для основного состояний имеет место **вариационный принцип**:

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

Это означает, что волновая функция основного состояния  $\psi_0$  и его энергия получаются из условия (5.1) на пространстве всех гладких функций. Волновая функция  $\psi_1$  первого возбуждённого состояния и его энергия получаются из такого же условия на пространстве всех гладких функций, ортогональных к  $\psi_0$ . Следующие волновые функции находятся сходным образом.

**Вариационный метод** состоит в использовании условия (5.1) для приближённого вычисления волновых функций и энергий различных систем.

Для этого сначала угадывают правдоподобную форму волновой функции  $\psi(\beta, x)$  в зависимости от каких-нибудь параметров  $\beta$  — *пробную функцию* и вычисляет среднее значение энергии с этой волновой функцией  $E(\beta)$ . После этого (5.1) становится простой задачей нахождение минимума функции  $E(\beta)$ . (Оценки энергии основного состояния в простых потенциалах на основе соотношения неопределённостей § 1.9 были упрощённой версией вариационного метода.)

Напомним, что истинная энергия основного состояния  $E_0$  — это минимум (5.1) на пространстве всех возможных волновых функций (всех функций пространства  $L_2$ ), а вариационный метод даёт только минимум  $E_{0\beta}$  на очень малой части этого пространства — пространстве функций  $\psi(\beta, x)$ . Поэтому найденное вариационным методом значение энергии основного состояния  $E_{0\beta}$  лежит не ниже истинного  $E_0$ ,

$$E_{0\beta} \geq E_0.$$

◇ Чтобы найти первое возбуждённое состояние, угадывают волновую функцию, ортогональную к найденной функции основного состояния и зависящую от другого параметра  $\beta_1$ . Затем повторяется описанная выше процедура. Разумеется, качество описания для возбуждённого состояния хуже, чем для основного, поскольку в основе лежит найденное неточное описание основного состояния.

◆ Если система обладает какой-нибудь симметрией, то её состояния можно дополнительно классифицировать по собственным значениям соответствующих сохраняющихся величин. Волновые функции, отвечающие таким различным собственным значениям, автоматически ортогональны. Так, в случае сферической симметрии сохраняется квадрат полного момента импульса, принимающий значения  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ , где  $\ell$  — целое число (гл. 8). Вариационный метод позволяет искать самые низкие уровни энергии при каждом частном значении  $\ell$ .

◇ *Удобный технический приём.* При вычислении среднего значения кинетической энергии можно обойтись без громоздкого вычисления второй производной от волновой функции, сводя вычисление среднего  $\int \psi^*(x) \hat{p}^2 \psi(x) dx$  к вычислению среднего значения квадрата вспомогательной функции  $\alpha(x) = \hat{p}\psi(x)$ . Действительно, эрмитовость оператора  $\hat{p}$  позволяет записать

$$\int \psi^*(x) \hat{p}^2 \psi(x) dx = \int (\psi^*(x) \hat{p}) (\hat{p}\psi(x)) dx \equiv \int \alpha^*(x) \alpha(x) dx.$$

**Простейший пример:** рассмотрим поле  $U = -G\delta(x)$  и воспользуемся пробной функцией вида  $\psi_b = \pi^{-1/4} b^{-1/2} \exp(-x^2/2b^2)$  со свободным параметром  $b$ , который надлежит найти с помощью вариационного метода. 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  $b$ :  $b_{\min} = \hbar^2 \sqrt{\pi} / (2mG)$ , откуда  $E_{\min} = -mG^2 / (\pi \hbar^2)$ . Сравните эти выражения с точным решением (задача 2.11).

• На практике вариационный метод используют, например, при описании сложных многоэлектронных систем. В качестве исходной волновой функции берут должным образом симметризованную суперпозицию произведений волновых функций отдельных электронов в усред-

нённом поле остальных электронов и ядер. Параметры этого (*самосогласованного*) поля и подлежат определению.

### § 5.3. Теория возмущений. Общее рассмотрение

Пусть гамильтониан  $\hat{H}$  изучаемой физической задачи *мало* отличается от гамильтониана  $\hat{H}_0$ , чьи собственные состояния  $|n\rangle_o$  и энергии  $E_n^{(0)}$  известны, т. е.  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ ,  $\hat{H}_0|n\rangle_o = E_n^{(0)}|n\rangle_o$ . Гамильтониан  $\hat{H}_0$  называют невозмущённым, а  $\hat{V}$  — *возмущением*. Что такое *мало*, выяснится немного позднее. Для удобства изложения мы будем писать сначала  $\varepsilon\hat{V}$  вместо  $\hat{V}$  и вести расчёт так, будто бы  $\varepsilon \rightarrow 0$ . В конце мы положим  $\varepsilon = 1$ , сохраняя требование малости за самим возмущением.

Решение уравнения Шредингера в виде ряда по возмущению  $V$  составляет содержание **теории возмущений** (её называют *нередко теорией возмущений Рэлея-Шредингера*).

Итак, мы ищем решение уравнения Шредингера

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

Без потери общности будем считать набор собственных векторов  $|n\rangle_o$  ортонормированным,  ${}_o\langle m|n\rangle_o = \delta_{mn}$ .

Полезно записать оператор возмущения  $\hat{V}$  в представлении собственных векторов невозмущённого гамильтониана — в виде матрицы

$$V_{mn} = {}_o\langle m|\hat{V}|n\rangle_o \equiv V_{nm}^*. \quad (5.3)$$

Разложим решения уравнения (5.2)  $|n\rangle$  по собственным функциям  $|m\rangle_o$  невозмущённого гамильтониана  $\hat{H}_0$ , а затем разложим в ряд по  $\varepsilon$  энергии  $E_n$  и коэффициенты разложения  $|n\rangle$  по  $|m\rangle_o$ :

$$\begin{aligned} |n\rangle &= \sum_m c_{nm} |m\rangle_o, \quad c_{nm} = c_{nm}^0 + \varepsilon c_{nm}^1 + \varepsilon^2 c_{nm}^2 + \dots, \\ E_n &= E_n^{(0)} + \varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (5.4)$$

После этого уравнение (5.2) примет вид

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

Умножим это уравнение скалярно слева на  ${}_o\langle k|$ . С учётом ортонормированности базиса  $|n\rangle_o$ , т. е.  ${}_o\langle k|m\rangle_o = \delta_{km}$ , и определения (5.3) мы получим:

$$\begin{aligned} & \sum_m (E_k^{(0)} \delta_{km} + \varepsilon V_{km}) (c_{nm}^0 + \varepsilon c_{nm}^1 + \varepsilon^2 c_{nm}^2 + \dots) = \\ & = (E_n^{(0)} + \varepsilon E_n^{(1)} + \varepsilon^2 E_n^{(2)} + \dots) \cdot (c_{nk}^0 + \varepsilon c_{nk}^1 + \varepsilon^2 c_{nk}^2 + \dots). \end{aligned} \quad (5.5)$$

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

### § 5.4. Теория возмущений. Невырожденный случай

Разберём сначала технически простейший случай, когда состояния исходной системы не вырождены,  $E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$ .

▼ Нулевое приближение получается из (5.5) при  $\varepsilon \rightarrow 0$ . При этом уравнение (5.5) 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  $\varepsilon$  в (5.5). При  $k = n$  остаются два слагаемых и получается  $E_n^{(1)} = V_{nn}$ . При  $k \neq n$  получается уравнение

$$V_{kn} + (E_k^{(0)} - E_n^{(0)})c_{nk}^1 = 0 \Rightarrow c_{nk}^1 = \frac{V_{kn}}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad E_n^{(1)} = V_{nn}. \quad (5.6)$$

При этом коэффициент  $c_{nn}^1$  не определяется. Обычно принимают  $c_{nn}^1 = 0$ . Условие сохранения нормы возмущённого вектора состояния даёт отличие  $c_{nn}$  от нуля только во втором порядке по  $\varepsilon$ .

▼ Второе приближение получается, если приравнять выражения при второй степени  $\varepsilon$  в (5.5). При  $k = n$  оно даёт

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{V_{mn} V_{nm}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \equiv \sum_{m \neq n} \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}. \quad (5.7)$$

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

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

$$\begin{aligned} c_{nm} &= \delta_{nm} + \frac{V_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots; \\ E_n &= E_n^{(0)} + V_{nn} + \sum_{m \neq n} \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} + \dots \end{aligned} \quad (5.8)$$

В большинстве практически интересных задач этого достаточно.

#### 5.4.1. Производная энергии по параметру

Простейшее применение идей теории возмущений даёт изучение изменения энергии состояния при небольшом изменении какого-нибудь параметра.

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

$$\hat{H}(\lambda + \Delta\lambda) \equiv \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad \text{где} \quad \hat{V} = \Delta\lambda \partial \hat{H} / \partial \lambda.$$

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

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle n \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right| n \right\rangle. \quad (5.9)$$

#### 5.4.2. Примеры. Возмущения для гармонического осциллятора. Тепловое расширение кристаллов

Хороший пример даёт вычисление поправок первого неисчезающего приближения для осциллятора под действием возмущений<sup>1</sup>:

$$V = \begin{cases} (a) & a\hbar\omega \frac{x\sqrt{2}}{x_o}; & (б) & b\hbar\omega \left(\frac{x\sqrt{2}}{x_o}\right)^2; \\ (в) & A\hbar\omega \left(\frac{x\sqrt{2}}{x_o}\right)^3; & (г) & B\hbar\omega \left(\frac{x\sqrt{2}}{x_o}\right)^4; \end{cases} \left(x_o = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\right). \quad (5.10)$$

<sup>1</sup>Мы выделили размерные множители так, чтобы величины  $a, b, A, B$  стали безразмерными.

**Поправки к энергии** для случаев (а) и (б) сравните с легко получающимися точными решениями, (а)  $E_N = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega a^2$  и (б)  $E_N = -\hbar\omega\sqrt{1+4b} \left(n + \frac{1}{2}\right)$ . Покажите, что в случаях (в) и (г)

$$(в) \frac{E_n^{(2)}}{\hbar\omega} = -A^2 [4(3n^2+3n+1)+1]; \quad (г) \frac{E_n^{(1)}}{\hbar\omega} = 3B(2n^2+2n+1). \quad (5.11a)$$

Более важным, чем сами значения уровней, является изменение расстояния между ними  $\Delta E_n \equiv E_n - E_{n-1}$ . Из (5.11a) получается

$$(в) \frac{\Delta E_n^{(2)}}{\hbar\omega} = -24A^2 n; \quad (г) \frac{\Delta E_n^{(1)}}{\hbar\omega} = 12Bn. \quad (5.11b)$$

Обратите внимание, что за счёт вклада кубической нелинейности уровни смещаются только вниз, с ростом  $n$  уровни сближаются.

**Волновые функции** первого приближения мы снабжаем значком <sub>1</sub>. С помощью (5.6) получается (случай (г) не выписывается из-за громоздкости ответа)

$$\begin{aligned} (а) |n\rangle_1 &= |n\rangle_o - a\sqrt{n+1}|n+1\rangle_o + a\sqrt{n}|n-1\rangle_o, \\ (б) |n\rangle_1 &= |n\rangle_o - b\sqrt{(n+1)(n+2)}|n+2\rangle_o + b\sqrt{n(n-1)}|n-2\rangle_o, \\ (в) |n\rangle_1 &= |n\rangle_o - 3A(n+1)^{3/2}|n+1\rangle_o + 3An^{3/2}|n-1\rangle_o - \\ &\quad \frac{A}{3}\sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)}|n+3\rangle_o + \frac{A}{3}\sqrt{n(n-1)(n-2)}|n-3\rangle_o. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Пусть для невозмущённой задачи  $x = 0$  — точка равновесия, т. е.  ${}_o\langle n|x|n\rangle_o = 0$ . **Среднее смещение точки равновесия**  $\Delta x_n \equiv \langle n|x|n\rangle_1$  в первом порядке вычисляется с помощью (5.4):

$${}_1\langle n|x|n\rangle_1 = \sum_k (c_{nk}^1 {}_o\langle n|x|k\rangle_o + c_{kn}^1 {}_o\langle k|x|n\rangle_o).$$

Для возмущений гармонического осциллятора в этой сумме остаются только значения  $k = n \pm 1$ . Рассмотрим далее возмущения (5.10). Для сохраняющих симметрию возмущений (б) и (г) точка равновесия не смещается. Для остальных возмущений с помощью (5.12) получается

$$\Delta x_n \equiv {}_1\langle n|x|n\rangle_1 = \left\{ (а) : -2a \frac{x_o}{\sqrt{2}}, \quad (в) : -6A(2n+1) \frac{x_o}{\sqrt{2}} \right\} \quad (5.13)$$

• **Коэффициент расширения.** В главном приближении кристаллическая решётка аппроксимируется набором нормальных колебаний осцилляторов (см. § 7.8), получающихся из осцилляторного взаимодействия ионов между собой (при отклонении от равновесия на величину  $x$  энергия растёт пропорционально  $x^2$  — как в осцилляторе). При нагревании возбуждаются все состояния осциллятора. Для уровня с энергией  $E_n$  вероятность возбуждения составляет  $e^{-E_n/kT}/Z$  (*распределение Больцмана*). (*Статистическая сумма  $Z$  — постоянная, которая определяется из условия нормировки  $Z = \sum e^{-E_n/kT}$ .*)

В главном — гармоническом — приближении средние значения смещений остаются равными нулю, т. е. при нагревании видимые размеры кристалла не меняются. Учёт ангармонизма — следующего, кубического, члена разложения потенциала по  $x$  (5.10(б)) приводит к смещению точки равновесия на величину  $\Delta x_n$ , растущую по величине с увеличением энергии уровня (5.13). Суммирование по всем состояниям осциллятора с весом, задаваемым распределением Больцмана, даёт

$$\Delta x(T) = \sum_n \Delta x_n e^{-E_n/kT} / Z \equiv -6A \frac{x_0}{\sqrt{2}} \sum_n (2n+1) e^{-E_n/kT} / Z. \quad (5.14)$$

Чтобы вычислить эту сумму, вспомним, что  $E_n = \hbar\omega(2n+1)/2$  и обозначим  $\beta = \hbar\omega/2kT$ . Начнём с вычисления статистической суммы  $Z = e^{-\beta} \sum (e^{-2\beta})^n$ . Это — геометрическая прогрессия, и её сумма есть

$$Z = \frac{e^{-\beta}}{1 - e^{-2\beta}} = \frac{1}{2 \operatorname{sh} \beta}.$$

Теперь видно, что  $\sum_n (2n+1) e^{-E_n/kT} = -\partial Z / \partial \beta$ . В итоге искомое среднее смещение (5.14) принимает вид

$$\Delta x(T) = 6A \frac{x_0}{\sqrt{2}} \cdot d \ln Z / d\beta = 6A \frac{x_0}{\sqrt{2}} \operatorname{cth} \beta. \quad (5.15a)$$

С ростом температуры эффективный размер элементарной ячейки кристалла растёт как  $a(T) = a + |\Delta x(T)|$  (сдвиг положения равновесия в любую сторону увеличивает размер ячейки на величину этого сдвига).

При описании реального кристалла следует просуммировать это выражение по всем возможным нормальным колебаниям кристалла

(§ 7.8 и (4.35)). Обозначая через  $\rho(\omega)$  плотность числа возможных колебаний с частотой  $\omega$ , имеем взамен (5.15a)

$$a(T) = a + \int \rho(\omega) d\omega 6A(\omega) \frac{x_0}{\sqrt{2}} \operatorname{cth}(\hbar\omega/2kT). \quad (5.15b)$$

Мы оставляем анализ зависимости  $a(T)$  для специальных курсов.

### 5.4.3. Условия применимости

Говоря о применимости теории возмущений, следует различать два источника погрешностей.

Во-первых, мы обычно имеем дело с выражениями для потенциалов и их возмущений, которые сами по себе являются приближениями, справедливыми в ограниченной области. Так, для реальных физических задач рост осцилляторного потенциала  $m\omega^2 x^2/2$  ограничивается при не слишком больших значениях  $x$ , как это обсуждалось в разд. 4.1.1. Тем более возмущение не должно искажать сильно форму базового потенциала в исследуемой области. С этой точки зрения невозможно рассчитывать, что простые ангармонизмы типа  $Ax^3$ ,  $Bx^4$  могут описывать реальность в достаточно широкой области. Следовало бы взамен них изучать возмущения вида, например,  $Ax^3/(1+dx^2)$ ,  $Bx^4/(1+gx^2)$ . К сожалению, расчёт для таких, более реалистических, возмущений технически сложен. В реальности, используются и идеализированный потенциал и идеализированное возмущение и оценивается применимость низших порядков теории возмущений для вычисления поправок к нескольким низшим состояниям системы.

Встречающееся иногда применение теории возмущений в попытках описания ситуации вне области применимости (5.16) может служить источником грубых ошибок в понимании ситуации.

**Критерий применимости первых приближений теории возмущений.** 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

$$|V_{mn}| \ll |E_m^{(0)} - E_n^{(0)}|. \quad (5.16)$$

Простейшую иллюстрацию дают поправки к уровням энергии осциллятора для возмущений (5.10). Качественная оценка здесь очень

проста. Согласно (4.16), характерное значение  $\langle x^2 \rangle \sim x_o^2 n$ . Поэтому характерное значение величины  $\langle (x/x_o)^3 \rangle \sim n^{3/2}$ , а величины  $\langle (x/x_o)^4 \rangle \sim n^2$ . Соответствующие возмущения можно считать малыми поправками до тех пор, пока они не сильно изменяют основной потенциал  $\sim \langle (x/x_o)^2 \rangle \sim n$ , т. е. при  $|A\sqrt{n}| \ll 1$ ,  $Bn \ll 1$ . Формулы (5.11) просто уточняют эти оценки. Этим условиям достаточно и для малости поправок нескольких следующих порядков.

Помимо этого, в реальных задачах гамильтониан осциллятора является лишь приближением, пригодным при не слишком больших  $x$ . При достаточно больших  $x$  взаимодействие исчезает, рост потенциала останавливается, как это обсуждается на стр. 110. В приложении F.1 обсуждается общая картина в невероятном случае, когда потенциал осциллятора с кубической и четвертичной нелинейностями (5.10) описывает физическую ситуацию при очень больших значениях  $x$ .

### § 5.5. Теория возмущений при наличии вырождения

Вырождение означает, что в исходной системе по крайней мере одному собственному значению  $E_n^0$  соответствует  $s > 1$  линейно независимых собственных векторов, которые в дальнейшем мы будем считать ортогональными. При попытке воспользоваться полученными выше результатами обнаруживается, что некоторые из знаменателей (5.8) обращаются в нуль. Это не опасно в 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 набор из всех  $s$  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 векторы образуют ортонормированный базис в  $s$ -мерном подпространстве  $C_s$  всего пространства состояний. Любой вектор из  $C_s$  (любая линейная комбинация векторов  $|nj\rangle$ ) является собственным вектором невозмущенного гамильтониана с одним и тем же собственным значением  $E_n^0$ :

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

Проблема деления на ноль исчезает в таком базисе  $|\tilde{n}\alpha\rangle$ , в котором все

недиагональные матричные элементы возмущения обращаются в ноль (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** даёт плоский осциллятор разд. 4.3,  $\hat{H}_0 = (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2)/(2m) + m\omega^2(x^2 + y^2)/2$ . Этот гамильтониан обладает симметрией относительно вращений в плоскости  $(x, y)$ . Энергии его уровней — суммы энергий независимых осцилляторов по осям  $x$  и  $y$ , т. е.  $E_n^{(0)} = \hbar\omega(n_x + 1/2 + n_y + 1/2) \equiv \hbar\omega(n + 1)$ . 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  $n_y$ ).

Выберем для детального разбора состояние с  $n = 3$ . Собственные векторы этого состояния в базисе  $|n_x\rangle, |n_y\rangle$  — 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 образуют базис пространства  $C_s \equiv C_4$ . Рассмотрим разные возмущения в  $C_4$ .

◇ Возмущение  $V = b(x^2 + y^2)^2$  сохраняет исходную симметрию. Матрица возмущения диагональна и пропорциональна единичной. Недиагональных элементов нет, нет и проблемы деления на ноль.

◇ Возмущение  $V = bx^2$  нарушает симметрию. Оно «направлено» вдоль одной из первоначально выбранных осей. Матрица возмущения диагональна, но не пропорциональна единичной —  $bx_o^2/2 \cdot \text{diag}(7, 5, 3, 1)$ . Недиагональные элементы отсутствуют, проблемы деления на ноль не возникает.

◇ Возмущение  $V = b(x + y)^2/2$  получается из предыдущего при повороте осей на  $45^\circ$ , поэтому и результат здесь должен совпадать с предыдущим. Однако при нашем выборе осей матрица возмущения уже не диагональна. Она имеет вид:

$$\frac{bx_o^2}{4} \begin{pmatrix} 8 & 2\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 2\sqrt{3} & 8 & 4 & 0 \\ 0 & 4 & 8 & 2\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 2\sqrt{3} & 8 \end{pmatrix}.$$

Диагонализация этой матрицы даёт, как и следовало ожидать, те же собственные значения, что и в предыдущем случае. Новые собственные векторы получаются из старых вращением осей на  $45^\circ$ . После этой диагонализации проблема деления на ноль исчезла, задача свелась к предыдущей.

• Обычно вырождение возникает в силу наличия какой-то симметрии невозмущённого гамильтониана (ср. § 2.2) (в нашем примере — 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 отыскании такого базиса в пространстве состояний  $C_s$ , принадлежащих избранному невозмущённому значению энергии, что оператор возмущения становится в нём диагональным.

**Общий случай.** Рассмотрим в уравнении (5.5) в качестве состояния  $|k\rangle_o$  одно из состояний  $|ni\rangle_o$ . Тогда в нулевом порядке по  $\varepsilon$  получается тождество  $E_n^{(0)} = E_n^{(0)}$  и не возникает уравнений для  $c_{nj,ni}^0$ . (Если взять в качестве состояния  $|k\rangle_o$  любое из состояний  $|ma\rangle_o$  с  $E_m^0 \neq E_n^0$ , то немедленно получается  $c_{nj,ma}^0 = 0$ .) Система уравнений для  $c_{nj,ni}^0$  получается в первом порядке по  $\varepsilon$ :

$$\sum (V_{ij} - E_{n\alpha}^{(1)} \delta_{ij}) c_{n\alpha,nj}^0 = 0. \quad (5.17)$$

Решения этой системы однородных уравнений для коэффициентов  $c_{\alpha j}^0$  — не нули, только если обращается в ноль определитель, составленный из коэффициентов при неизвестных:

$$\det |V_{ij} - E_{n\alpha}^{(1)} \delta_{ij}| = 0. \quad (5.18)$$

(Это уравнение называют *секулярным*.) Оно имеет  $s$  корней  $E_{n\alpha}^1$  — собственных значений матрицы  $V_{ij}$  — первых поправок к значению энергии вырожденного уровня. След матрицы при диагонализации не меняется, 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 (5.17) позволяет выразить  $s-1$  коэффициент  $c_{\alpha j}$  через один из них. С учётом условия

нормировки определяются все эти коэффициенты, т. е. «повернутые» собственные векторы задачи

$$|\alpha\rangle = \sum_j c_{\alpha j} |n, j\rangle_o. \quad (5.19)$$

Дальнейшие поправки отыскиваются так же, как и в невырожденном случае<sup>1</sup>.

*Пример.* Для **двухуровневой системы** секулярное уравнение имеет вид

$$(s = 2) : \quad \begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \quad (5.20)$$

$$\Rightarrow E_{\pm}^{(1)} = \frac{V_{11} + V_{22} \pm \Delta E}{2}, \quad \Delta E = \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}.$$

Соответствующие волновые функции (5.19) в этом случае имеют вид

$$\begin{aligned} |+\rangle &= c_{1+}|1\rangle + c_{2+}|2\rangle, & |-\rangle &= c_{1-}|1\rangle + c_{2-}|2\rangle; \\ c_{1+} = -c_{2-} &= \sqrt{\frac{\Delta E + V_{11} - V_{22}}{2\Delta E}}, & c_{2+} = c_{1-} &= \sqrt{\frac{\Delta E - V_{11} + V_{22}}{2\Delta E}}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

### 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.*) В соответствующих рядах теории возмущений появляются слагаемые с малыми знаменателями, сходимость ряда ухудшается.

<sup>1</sup>Случается, что вырождение не снимается в первом порядке теории возмущений, но снимается в более высоких порядках. Видоизменение способа действия для таких задач представляется очевидным.

Ситуация улучшится, если для каждой из упомянутых групп ввести «гамильтониан асимметрии»  $\Delta\hat{H}$ , собственными значениями которого являются отклонения невозмущённых 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  $\varepsilon_i$  невозмущённые энергии состояний упомянутых групп при  $\Delta\hat{H} = 0$ . Повторяя выкладки случая с вырождением для каждой из этих групп, мы придем к уравнениям вида (5.17), (5.18) с заменой

$$V_{ij} - E_{n\alpha}^1 \delta_{ij} \Rightarrow V_{ij} - (E_{n\alpha}^1 + \varepsilon_i) \delta_{ij}. \quad (5.22)$$

Окончательный ответ имеет тот же вид, что и в случае вырождения, с заменой  $V_{ii} \rightarrow \tilde{V}_{ii} = V_{ii} + \varepsilon_i$ . В частности, для двухуровневой системы секулярное уравнение легко получается из (5.20),

$$\begin{vmatrix} V_{11} + \varepsilon_1 - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} + \varepsilon_2 - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0, \quad (5.23)$$

а собственные функции состояний с этой энергией имеют вид (5.21) с элементарными видоизменениями.

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 в энергии):

$$E_+^{(1)} = \varepsilon_1 + V_{11} + \frac{|V_{12}|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}, \quad E_-^{(1)} = \varepsilon_2 + V_{22} + \frac{|V_{12}|^2}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1},$$

$$|+\rangle = |1\rangle + \frac{V_{12}}{\varepsilon_1 - \varepsilon_2} |2\rangle, \quad |-\rangle = |2\rangle + \frac{V_{21}}{\varepsilon_2 - \varepsilon_1} |1\rangle.$$

∇ Рассмотрим, как меняются положения получившихся уровней с изменением возмущения. Будем описывать это изменение параметром  $\xi$ . Пусть при некотором  $\xi = \xi_o$  оказывается  $V_{11} = V_{22}$ . Тогда — на первый взгляд — при переходе от  $\xi > \xi_o$  к  $\xi < \xi_o$  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 (5.20) было  $\Delta E = 0$ . Для этого недостаточно условия  $\tilde{V}_{11}(\xi) = \tilde{V}_{22}(\xi)$ , необходимо ещё, чтобы было  $V_{12}(\xi) = 0$ . Это — два разных уравнения для одной величины  $\xi$ , обычно их одновременное решение отсутствует (если при этом не восстанавливается старая симметрия или не появляется новая). *Пересечение уровней — очень редкое событие в природе.*

∇ Представляется полезным сделать простое замечание. Как мы видели, в невырожденном случае поправки к волновым функциям малы, т. е. лишь немного модифицируют невозмущённые функции. В отличие от этого, в задаче с вырождением различие между новыми и старыми волновыми функциями, вообще говоря, не является малым. Дело в том, что и те и другие функции в равной мере являются собственными функциями невозмущённого гамильтониана; они просто отвечают разным выборам базиса — повороту в пространстве  $C_s$ . Исходный набор в этом пространстве выбран наудачу, а новый набор подстроен ещё и под возмущение.

## § 5.6. Задачи

1. С помощью вариационного метода и используя пробные функции трёх типов

$$(\alpha) \boxed{Ce^{-x^2/2a^2}}, \quad (\beta) \boxed{Ce^{-|x|/a}},$$

$$(\gamma) \boxed{\{1 - |x|/a \text{ при } |x| < a, \quad 0 \text{ при } |x| > a\}}$$

найти энергию и волновую функцию основного состояния для следующих систем:

а/ гармонический осциллятор, пробные функции  $\alpha$  и  $\beta$ ;

б/ ангармонический осциллятор  $U = m\omega^2 x^2/2 + \varepsilon x^4$ , пробная функция  $\alpha$ ;

в/ яма  $U = -G\delta(x)$ , пробные функции  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ ;

г/ поле  $U(x) = F|x|$ , пробная функция  $\beta$ .

Где возможно, сравнить с результатами оценки с помощью соотношения неопределённостей и с точными значениями (для случая г/ энергия  $E_o = 1,856(\hbar^2 mg^2)^{1/3}$ .)

2. Используя (5.1), покажите, что при переходе от потенциала  $U(x)$  к потенциалу  $U(x) + \Delta U(x)$  с  $\Delta U(x) \leq 0$  энергия основного состояния уменьшается.
3. Получите (5.11).
4. Бесконечный осцилляторный потенциал в природе не реализуется. В реальности на больших расстояниях рост потенциала «останавливается». Выбрав в качестве модели такой остановки замену в потенциале осциллятора  $x^2 \rightarrow x^2 / (1 + x^2/b^2)$ , оценить качество приближения эквидистантности уровней осциллятора для разных его уровней с помощью (5.11). Сравните с точным результатом примера на стр. 109.
5. Вычислите в первом исчезающем приближении поправки к уровням под действием возмущения  $V$  в следующих полях  $U$ :
  - а)  $U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } |x| < a, \\ \infty & \text{при } |x| > a, \end{cases} \quad V = (\alpha) G\delta(x), \quad (\beta) C \cos \frac{2\pi x}{a};$
  - б)  $U(x, y) = \frac{m\omega^2(x^2 + y^2)}{2}, \quad V = \alpha xy;$
  - в)  $\hat{H}_0 = \frac{\hat{L}_z^2}{2I}; \quad (\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}); \quad V = V_0 \cos(\varphi - \alpha)$  (основное и два первых возбуждённых состояния);
  - г)  $U(\mathbf{r}) = m\omega^2 \mathbf{r}^2 / 2; \quad V = \gamma x^2 y^2.$
  - д)  $U(x, y) = m\omega^2[(4 + 4\varepsilon)x^2 + y^2]/2 \quad (\varepsilon \ll 1); \quad V = axy^2.$  Найти поправки к трём нижним уровням. Особо рассмотреть случай  $\varepsilon = 0$  (резонанс Ферми).
6. 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 ещё случай  $2mGa/\hbar^2 \ll 1$ .

7. Для задачи о расширении твёрдого тела, стр. 134, оцените, при каких температурах решение с помощью первого порядка теории возмущений имеет смысл?
8. Изобразите качественно типичную зависимость уровней от параметра  $\xi$  при переходе через точку  $V_{11} = V_{22}$  для задачи о «пересечении уровней», обсуждавшейся в конце § 5.5. Для примера рассмотрите какой-нибудь конкретный пример такой зависимости.

## Глава 6

# Методы приближений. II. Квазиклассический случай

Ещё один метод приближённого решения квантовомеханических задач работает в случаях, когда потенциал — плавная функция координаты так, что *почти всюду* дебройлевская длина волны  $\lambda$  мала по сравнению с масштабом изменения потенциала  $d$ , и эта длина волны меняется с координатой медленно (грубо говоря, параметр малости —  $\lambda/d$ ). Это близко к картине приближения лучей в классической оптике, которое, в свою очередь, допускает описание, подобное классической механике. В этом подходе сначала строится классическое описание, а затем отыскиваются квантовые поправки. Формально этот — *квазиклассический* — случай (приближение Венцеля–Крамерса–Бриллюена — ВКБ) реализуется, когда величины размерности действия велики по сравнению<sup>1</sup> с постоянной Планка  $\hbar$ .

Квазиклассическое приближение *удобно* строить как разложение по степеням  $\hbar$ . Такое разложение по размерному параметру, строго говоря, не имеет смысла. К сожалению, записать соответствующий безразмерный параметр в простой универсальной форме для общего случая не удаётся. Если для потенциала можно указать характерный масштаб энергии  $U$  и характерный масштаб его изменения  $d$ , то можно ожидать, что квазиклассическое описание будет справедливо, если характерная величина кинетической энергии, связанная с локализацией в области действия потенциала  $\hbar^2/(2md^2)$ , мала по сравнению с характерным значением потенциала,

$$\xi^2 = \frac{\hbar^2}{2mUd^2} \ll 1 \quad (6.1)$$

---

<sup>1</sup>Приближение ВКБ применяется для описания распространения волн в слоистых средах, колебаний мембран и в ряде других задач.

(иными словами, если локализация частицы в области действия потенциала мало меняет её классическую энергию). Это *глобальное* условие определяет возможность использования квазиклассического подхода, но не гарантирует, что квазиклассическое приближение применимо в любой точке. *Локальное* условие применимости квазиклассического приближения обсуждается на стр. 147. В условиях применимости приближения (6.1) разложение по степеням постоянной Планка можно трактовать как разложение по степеням  $\xi$ . (Для гармонического осциллятора и кулоновской задачи указать характерные значения  $U$  и  $d$  невозможно, здесь работает только локальное условие.)

Простой анализ рассматриваемым методом допускает случай, когда переменные разделяются так, что интересующее нас движение можно рассматривать как одномерное (в механике это соответствует возможности описания в переменных действие — угол). Обобщение на трёхмерные задачи в общем случае невозможно. Мы разбираем ниже только одномерное движение.

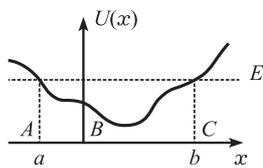


Рис. 3. Типичная квазиклассическая яма

**Терминология.** Ниже используется терминология классической задачи для потенциала рис. 3. Так, область, где полная энергия больше потенциальной,  $E > U(x)$ , (между точками A и C) — *область классического движения*. Область, где полная энергия меньше потенциальной,  $E < U(x)$  (левее A и правее C), — *классически недостижимая область*. Точки (A и C), 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*  $1/\varkappa(x)$ :

$$k(x) = \frac{\sqrt{2m(E - U(x))}}{\hbar}, \quad \lambda(x) = \frac{2\pi}{k(x)} \quad \text{при } E > U(x),$$

$$\varkappa(x) = \frac{\sqrt{2m(U(x) - E)}}{\hbar} \quad \text{при } E < U(x).$$
(6.2)

◇ Простейший объект, поддающийся квазиклассическому описанию и хорошо известный читателю, это — прямоугольная потенциаль-

ная яма (разд. 2.6.1) или кусочно постоянный потенциал при условиях  $k_i(b_i - a_i) \gg 1$ ,  $\kappa_i(b_i - a_i) \gg 1$ .

### § 6.1. 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, отдельных точек  $X_k$ , а также разрезов, начинающихся в некоторых из этих точек, 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

$$\psi(x) = e^{iS(x)/\hbar} \quad (6.3a)$$

и разложим функцию  $S(x)$  в ряд по степеням  $\hbar$ :

$$S = S_0 + (\hbar/i)S_1 + (\hbar/i)^2 S_2 + \dots \quad (6.3b)$$

Это — формальное разложение по размерной константе, однако его использование даёт разумный результат. Если определить величину  $d$  как размер, на котором существенно меняется потенциал, то можно сказать, что параметром разложения является величина  $1/kd \sim (\lambda/d)$ .

Подстановка (6.3a) превращает уравнение Шредингера в уравнение типа Рикатти  $(S'(x))^2 + 2m(U(x) - E) - i\hbar S''(x) = 0$ . Приравнявая члены с одинаковыми степенями  $\hbar$ , получим уравнения:

$$c(S'_0(x))^2 = 2m(E - U(x)), \quad S''_{n-1} = 2 \sum_{\nu=0}^n S'_\nu S'_{n-\nu} \quad (n \geq 1). \quad (6.3c)$$

Первое из этих уравнений совпадает с известным в аналитической механике уравнением Гамильтона–Якоби для *укороченного действия*  $S_0(x)$ , как функции координат, и легко решается:

$$S_0(x) = \pm \int p(x)dx. \quad (6.4a)$$

Второе уравнение (6.3с) при  $n = 1$  даёт

$$S_1' = -\frac{S_0''}{2S_0'} \equiv -\frac{p'(x)}{2p(x)} \Rightarrow S_1 = -\frac{1}{2} \ln(S_0') = -\frac{1}{2} \ln |p(x)|.$$

Следующий член квазиклассического ряда получается из уравнения (6.3с) при  $n = 2$ :  $S_2' = \mp(1/4) [p''/p^2 - 3p'^2/2p^3]$  (обычно он не используется).

Ряд (6.3b) почти во всех случаях — асимптотический, и смысл имеют только несколько первых членов этого ряда. Обычно удерживают первые два члена этого ряда, при этом

$$S(x) = \int \left( \pm p(x) - \frac{\hbar}{2i} \frac{p'(x)}{p(x)} \right) dx. \quad (6.4b)$$

В итоге в обозначениях (6.2) волновая функция имеет вид, подобный плоской волне, нормированной на поток (2.6b):

$$\psi(x) = \begin{cases} C_1 \psi_{+k} + C_2 \psi_{-k}, & \psi_{\pm k} = \frac{e^{\pm i\alpha}}{\sqrt{k(x)}} \quad \alpha = \int_{x_0}^x k(x) dx, \quad [E > U(x)]; \\ D_1 \psi_{+\kappa} + D_2 \psi_{-\kappa}, & \psi_{\pm \kappa} = \frac{e^{\pm \beta}}{\sqrt{\kappa(x)}} \quad \beta = \int_{x_0}^x \kappa(x) dx, \quad [E < U(x)]. \end{cases} \quad (6.5)$$

Нормировка фиксируется условиями задачи, а за предел интегрирования  $x_0$  в интегралах  $\alpha, \beta$  обычно выбирают одну из точек поворота.

Полученные выражения являются асимптотиками решений точного уравнения Шредингера при больших значениях  $|\alpha|, |\beta|$ . Для «волновых» решений  $\psi_{\pm k}$  в классически достижимой области выписанная суперпозиция несомненно имеет смысл. Для решений в классически недостижимой области (вторая строка (6.5)) это не совсем так. Одно из решений  $\psi_{+\kappa}, \psi_{-\kappa}$  экспоненциально велико, а другое экспоненциально мало. Погрешности приближения, дающие большую асимптотику, значительно больше малого асимптотического слагаемого. Учёт 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 асимптотика. Тем не менее, во многих задачах использование независимости определителя Вронского от координат позволяет уследить и за коэффициентом при малой экспоненте.

**Условия применимости приближения.** Чтобы квазиклассическое приближение было применимо, классическое действие  $S_o$  во всяком случае должно быть велико по сравнению с квантом действия

$$\int p(x)dx/\hbar \gg 1. \tag{6.6a}$$

Однако этого недостаточно. Приближение оправдано, если поправка мала по сравнению с главным членом, т. е. при  $\hbar|S_1(x)| \ll |S_o(x)|$ . Разумеется, надо рассматривать только зависящую от координат часть, поэтому аккуратнее записать это неравенство для производных:  $\hbar|S'_1(x)| \ll |S'_o(x)|$ . Подставляя сюда найденные выше выражения, получаем неравенство, определяющее применимость приближения в виде  $|\hbar S''_o| \ll (S'_o(x))^2$ . Отсюда прямым вычислением получаются две формы условия применимости приближения:

$$\left| \frac{m\hbar(dU/dx)}{p^3(x)} \right| \ll 1 \Rightarrow \frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| \ll 1. \tag{6.6b}$$

Последнее неравенство означает попросту, что введённые локальные величины (6.2) 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].

### § 6.2. Правила квантования Бора–Зоммерфельда. I

Пусть частица движется в поле потенциальной ямы вида рис. 3 и потенциал является аналитической функцией комплексной переменной  $x = x_r + iy$  при не очень больших отклонениях от действительной оси  $y$ . Тогда и истинная волновая функция задачи  $\psi$  — решение уравнения Шредингера представляет собой аналитическую функцию координаты  $x$  в той же области, которая не имеет особенностей на действительной оси, но может иметь на ней несколько ( $n$ ) нулей.

Вычислим интеграл  $\oint_{\mathcal{L}} [\psi'(x)/\psi(x)] dx$  от логарифмической производной  $\psi$  по контуру  $\mathcal{L}$ , примыкающему к действительной оси и охватывающему точки поворота так, что квазиклассическое приближение применимо на всем контуре. 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 между асимптотиками происходит на дугах, огибающих точки поворота.

Поскольку  $\psi$  — аналитическая функция координаты  $x$ , 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 неё), 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  $\alpha'$  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, причём ширина разреза в нашем пределе стремится к нулю. В окрестности точки поворота выражение для  $p(x)$  (6.2) 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

$$\alpha \hbar \equiv \oint_a^b p(x) dx \equiv \oint_a^b \sqrt{2m(E - U(x))} dx = 2\pi \hbar (n + 1/2), \quad (6.7)$$

где контурный интеграл отвечает интегрированию по всей классически достижимой области по обоим направлениям движения (по полному периоду классического движения), причём смене направления движения по  $x$  отвечает смена знака импульса (другое значение корня).

Полученный ответ означает, что в классически допустимой области укладывается  $n$  полуволн (как в прямоугольной яме). Вклад  $1/2$  возник из-за отличия «гладкой» ямы от прямоугольной.

Движение в глубокой прямоугольной потенциальной яме несомненно квазиклассично, только зависимость потенциала от координат вблизи точек поворота не аналитична. Поэтому естественно, что уравнения (1.21) и (2.21) дают энергии уровней бесконечно глубокой и просто глубокой потенциальной ямы, лишь немного отличающиеся от (6.7).

• **Нормировка и т. п.** Чтобы нормировать волновую функцию, вычислим интеграл от квадрата её модуля. Здесь 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 конце мы учли, что аргумент косинуса не мал, поэтому сам косинус быстро осциллирует, и его среднее значение близко к нулю. Неточность этой оценки уменьшается для состояний с большими  $n$ .)

В знаменателе последнего интеграла стоит классический 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  $0$ )  $T_{\text{кл}}$ , делённому на  $m$ . В итоге

$$A = \sqrt{\frac{4m}{\hbar T_{\text{кл}}}} \equiv \sqrt{\frac{2m\omega_{\text{кл}}}{\pi\hbar}} \quad \left( \omega_{\text{кл}} = \frac{2\pi}{T_{\text{кл}}} \right). \quad (6.8)$$

• **Производная по энергии.** В дальнейшем мы неоднократно будем использовать выражение для малого изменения величины  $\alpha$  (6.7) при небольшом изменении входящей в это выражение энергии  $E$ . Для этого вычислим производную

$$\frac{d\alpha}{dE} = \frac{1}{\hbar} \oint \frac{\partial p}{\partial E} dx = \frac{1}{\hbar} \oint \frac{m}{p} dx = \frac{T_{\text{кл}}}{\hbar}. \quad (6.9)$$

Отсюда, в частности, получается, что разность энергий соседних уровней  $\Delta E_n$ , которая согласно (6.7) отвечает приращению величины  $\alpha$  на  $2\pi$ , 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):

$$\Delta E_n \equiv E_{n+1} - E_n = \frac{2\pi\hbar}{T_{\text{кл}}} = \hbar\omega_{\text{кл}}. \quad (6.10)$$

• Обычно квазиклассическое условие (6.7) даёт хорошее приближение для уровней с большими  $n$  даже при не очень малых значениях параметра квазиклассичности  $\xi$ . Это подтверждается прямым вычислением в тех задачах, когда энергии уровней удаётся вычислить ещё и точно. Оказывается, что относительное отклонение квазиклассических значений энергии от точных — порядка  $O(1/n)$ .

При малых значениях параметра  $\xi$  (6.1) квазиклассическое выражение  $E_n^{qc}$  представляет собой хорошее приближение и для состояний с небольшими  $n$ , в том числе даже для основного состояния<sup>1</sup>.

◇ В классической механике интеграл во втором выражении (6.7) это — *adiaбатический инвариант*. В ранней версии квантовой механики (Бор) *постулировалось* правило квантования, состоящее в требовании, что адиабатический инвариант есть  $2\pi\hbar n$ , что при больших  $n$  близко к правильному соотношению (6.7).

<sup>1</sup>Точные значения энергии уровней можно записать в виде разложения по параметру квазиклассичности,  $E_n = E_n^{qc} + \xi^2 \mu_n + o(\xi^2)$ . Если вблизи минимума потенциал является гладкой функцией координаты, то как показал В.П. Маслов (см. [2]), для малых  $n$  имеют место оценки  $E_n^{qc} = O(\xi)$  и  $\mu_n = O(1)$ .

• При обсуждении многих задач классической физики используют понятие **фазового пространства** — пространства, координатами которого являются компоненты всех координат и всех импульсов частиц системы. В частности, для системы из  $N$  частиц в трёхмерном 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*  $\oint p dx$  растёт линейно с ростом номера состояния  $n$ , так что в фазовом пространстве на каждое состояние приходится площадь  $2\pi\hbar$ , и при достаточно больших  $n$  число возможных состояний в ячейке  $\Delta x \Delta p$  есть

$$\Delta n = \Delta x \Delta p / (2\pi\hbar). \quad (6.11)$$

### § 6.3. Условия сшивки

Неравенство (6.6b) носит *локальный характер*, оно может выполняться не при всех  $x$ , и положение области его применимости меняется с изменением энергии. По соглашению, квазиклассическим называют такой случай, когда на большей части прямой  $x$  квазиклассическое приближение применимо, а для описания остающихся небольших областей используются другие методы. Квазиклассическое приближение неприменимо вблизи точек поворота (при  $U(x) \approx E$ ), где  $d\lambda/dx \rightarrow \infty$ .

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 в точке поворота, которые имеют **приближённое уравнение** (6.3c) и получающиеся асимптотические решения, отвечают не существу исходного уравнения Шредингера, а используемому приближению. Поэтому единая асимптотика истинного решения может по-разному выглядеть в разных областях в окрестности точки поворота  $x = a$ . Правила сшивки и устанавливают соотношение между формами единой асимптотики с разных сторон от этой точки. Чтобы получить эти правила, решения (6.5) дополняют решением уравнения Шредингера в окрестности точки поворота, полученным вне рамок квазиклас-

сического приближения. Здесь можно записать разложение

$$U(x) = E + F \cdot (x - a), \quad (6.12)$$

где  $F$  — некоторый коэффициент (сила). Гладкость потенциала обычно обеспечивает справедливость этого приближения и на краю квазиклассической области так, что точное решение уравнения с потенциалом (6.12) при асимптотически больших отклонениях от точки поворота описывается ещё и квазиклассическим приближением.

Уравнение Шредингера для потенциала (6.12) 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 (6.13b). С другой стороны, в импульсном представлении уравнение Шредингера с потенциалом (6.12) принимает вид  $p^2\psi(p)/2m + iF\hbar d\psi(p)/dp = 0$ , его решение есть  $\psi(p) = A \cdot \exp(ip^3/6\hbar Fm)$ .

Естественный способ анализа состоит в изучении изменения асимптотики волновой функции при переходе из одной квазиклассической области в другую при движении точки в комплексной  $x$ -плоскости в обход точки поворота на таком расстоянии, что условие применимости квазиклассического приближения выполняется на всем этом пути. Этот метод<sup>1</sup> изложен в § В.8. Для описания результата обозначим

$$t(x) = \int \kappa(x') dx', \quad \alpha(x) = \int k(x') dx' + \pi/4.$$

Пределы (точка поворота и точка  $x$ ) расставлены так, что  $t(x)$  и  $\alpha(x)$  растут при удалении от точки поворота. (6.13a)

Тогда правила сшивки для перехода из классически недостижимой области в область классического движения имеют вид

$$\frac{A}{2\sqrt{\kappa}} e^{-t(x)} \leftrightarrow \frac{A}{\sqrt{k}} \sin \alpha(x), \quad \frac{B}{\sqrt{\kappa}} e^{t(x)} \leftarrow \frac{B}{\sqrt{k}} \cos \alpha(x). \quad (6.13b)$$

Нетрудно проверить, что Вронскианы выписанного решения с обеих сторон от точки поворота совпадают.

<sup>1</sup>Этот же подход даёт и упоминавшиеся выше асимптотики функций Эйри и описание обратного перехода от импульсного представления

Если по каким-то причинам волновая функция убывает при  $x \rightarrow \infty$  (например, этого требует граничное условие (2.17) — условие нормируемости волновой функции), то растущей экспоненты нет, и реализуется именно первое правило (6.13). Если же такого условия строгого убывания нет, растущая асимптотика доминирует, а в её «тени» может «спрятаться» падающая асимптотика с любым коэффициентом, и второе правило не даёт определённого предсказания.

Действительная ситуация более благоприятна. На одной из асимптотик, например,  $x \rightarrow -\infty$  асимптотика волновой функции точно известна, она или убывает (2.17), или обращается в уходящую или приходящую плоскую волну (2.32). Будем говорить для определённости о первом случае. При увеличении  $x$  мы приходим к первой точке поворота. Здесь первое правило (6.13) даёт 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 (6.13). Вклад, пропорциональный  $\cos \alpha$ , продолжается за точку поворота в растущее с ростом  $x$  решение по второму правилу (6.13). На первый взгляд, коэффициент при растущей экспоненте получен правильно, но вот за коэффициент при падающей экспоненте ручаться 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 (2.17) или (2.32).

• **Случай резкой границы вблизи точки поворота.**

*Если в небольшой окрестности точки поворота, потенциал меняется очень быстро, а вне этой окрестности потенциал — достаточно гладкая функция, то физическую реальность лучше описывает приближение скачкообразно меняющегося потенциала, для которого условия сшивки имеют вид (2.14), стр. 67.*

*Если классически достижимая область ограничена бесконечно высокой стенкой при  $x = a$  (это имеет место, например, при описа-*

нии радиального движения в трёхмерном случае, когда  $a = 0$ ), то при  $\psi(x = a) = 0$ , а квазиклассическое приближение справедливо вплоть до стенки, т. е.  $\psi(x < a) = 0$ , и

$$\psi(x > a) = \frac{C}{\sqrt{k}} \sin \left( \int_a^x p dx \right). \quad (6.14)$$

### § 6.4. Правила квантования Бора–Зоммерфельда. II

Получим теперь правило квантования Бора–Зоммерфельда (6.7) традиционным методом — с помощью правил сшивки. Для сокращения объёма вычислений мы рассмотрим потенциальную яму, изображенную на рис. 3, для которой область  $x < 0$  полностью недоступна (как

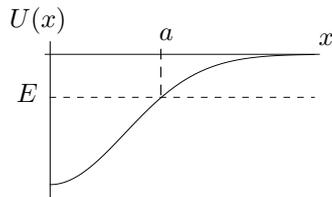


Рис. 3. Простейшая яма

для радиального движения в центрально-симметричном поле). Ищем уровни энергии, пользуясь алгоритмом, который подобен используемому при компьютерном моделировании.

Поскольку область  $x < 0$  недоступна, то в соответствии с (6.14)

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 (6.13), обозначим  $\varphi = \int_0^a k dx + \pi/4$  и  $\alpha = \int_x^a k dx + \pi/4$ , и перепишем волновую функцию внутри ямы в виде

$$\frac{A}{\sqrt{k}} \sin \left( \int_0^x k dx \right) = \frac{A}{\sqrt{k}} \sin(\varphi - \alpha) = \frac{A}{\sqrt{k}} (-\sin \alpha \cos \varphi + \cos \alpha \sin \varphi).$$

Далее воспользуемся условиями сшивки для каждого из слагаемых и получим волновую функцию в классически недоступной области:

$$\psi = \frac{A}{\sqrt{\varkappa}} \sin \varphi \cdot e^{t(x)} - \frac{A}{2\sqrt{\varkappa}} \cos \varphi \cdot e^{-t(x)}, \quad \text{где } t(x) = \int_a^x \varkappa dx.$$

Волновая функция должна убывать при  $x \rightarrow \infty$ . Поэтому стационарными являются только состояния, для которых коэффициент при растущей экспоненте ( $\sin \varphi$ ) обращается в ноль, т. е.  $\varphi = \pi(n+1)$ . 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

$$\oint \sqrt{2m(E - U(x))} dx = 2\pi\hbar(n + 3/4). \quad (6.15)$$

Покажите, что для потенциала, гладкого в обе стороны, условие квантования Бора–Зоммерфельда принимает вид (6.7). (Различие между  $1/2$  и  $3/4$  в (6.7) и (6.15) улавливается точностью приближения даже при умеренно больших  $n$ .)

◇ Правила квантования (6.7) и (6.15) выписаны для потенциала, достаточно гладкого, чтобы линейное приближение (6.12) работало и в области применимости квазиклассического приближения. Широкая прямоугольная потенциальная яма предоставляет нам пример системы, для которой применимо квазиклассическое приближение, а линейное приближение (6.12) несправедливо, и условия сшивки имеют совсем другой вид (2.14b). Это приводит к модификации правила квантования. В частности, для бесконечно глубокой ямы оно имеет вид  $\int \sqrt{2m(E - U(x))} dx = 2\pi\hbar n$  (целое число полувольт на полупериоде). Для потенциалов, быстро изменяющихся вблизи точки поворота правую часть правила квантования можно записать в виде  $2\pi\hbar(n + s)$ , где  $1/2 \leq s \leq 1$  и величина  $s$  зависит от крутизны потенциала и от величины его изменения в неквазиклассической области.

## § 6.5. Прохождение сквозь барьер

Рассмотрим одномерную задачу рассеяния § 2.7 для потенциала, изображенного на рис. 4 в случае, когда энергия частицы меньше максимальной потенциальной энергии и применимо квазиклассическое приближение. В соответствующей задаче классической механики области с разных сторон барьера не сообщаются друг с другом.

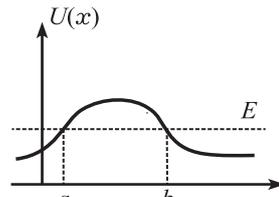


Рис. 4. Прохождение через барьер

В квантовом случае волновая функция, заданная, например, слева от барьера, не исчезает и справа от него, имеет место *подбарьерное прохождение* — *туннелирование* — ср. обсуждение в связи с (2.28), (2.40).

Далее мы воспроизводим вычисления § 2.7 и разд. 2.6.3 с естественной заменой правил (2.14) на правила сшивки (6.13). Мы увидим, что вероятность прохождения через барьер определяется величиной коэффициента прохождения (*туннелирования*), который оказывается естественным обобщением соответствующего коэффициента для прямоугольного барьера (2.40):

$$D_{\text{прям}} = e^{-2\kappa(b-a)} \Rightarrow D = \exp \left[ -2 \int_a^b \kappa(x) dx \right]. \quad (6.16)$$

(здесь  $a$  и  $b$  — точки поворота).

Справа от барьера мы имеем дело только с прошедшей волной

$$\begin{aligned} \psi_{\text{II}} &= \frac{C}{\sqrt{k}} e^{i \int_b^x k(x) dx + \pi/4} = \\ &= \frac{C}{\sqrt{k}} \left( \cos \left( \int_b^x k(x) dx + \pi/4 \right) + i \sin \left( \int_b^x k(x) dx + \pi/4 \right) \right). \end{aligned}$$

Прямое использование правил сшивки (6.13) даёт под барьером суперпозицию падающей и растущей экспонент

$$\begin{aligned} \psi_{\text{II}} &= \frac{C}{\sqrt{\kappa}} \left( e^{\int_b^x \kappa(x) dx} + \frac{i}{2} e^{-\int_b^x \kappa(x) dx} \right) \equiv \\ &\equiv \frac{C}{\sqrt{\kappa}} \left( \frac{1}{\sqrt{D}} e^{-\int_a^x \kappa(x) dx} + \frac{i}{2} \sqrt{D} e^{\int_a^x \kappa(x) dx} \right). \end{aligned}$$

Дальнейшее использование этих правил даёт слева от барьера

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}} &= \frac{2C}{\sqrt{D}k} \left( \sin \alpha + \frac{iD}{4} \cos \alpha \right) \equiv \\ &\equiv \frac{-iC}{\sqrt{D}k} \left[ \left( 1 - \frac{D}{4} \right) e^{i\alpha} - \left( 1 + \frac{D}{4} \right) e^{-i\alpha} \right], \\ \alpha &= \int_x^a k(x) dx + \frac{\pi}{4}. \end{aligned}$$

Нормируя падающую волну на единичный поток (т.е. полагая  $C = i\sqrt{D}/(1 + D/4)$ ), найдём, что амплитуда прошедшей волны в  $\sqrt{D}/(1 + D/4)$  раз меньше амплитуды падающей волны, т.е. при  $D \ll 1$  коэффициент туннелирования действительно совпадает с  $D$ .

При этом коэффициент отражения  $R = [(1 - D)/(1 + D/4)]^2$  близок к 1 — почти полное отражение. Нетрудно проверить, что полученный ответ демонстрирует и сохранение вероятности  $R + D = 1$ .

- Последовательное развитие продемонстрированных вычислений позволяет рассмотреть и распад квазистационарного состояния (Приложение F.2.2) и задачу об изменении состояний системы пары почти одинаковых ям в зависимости от расстояния между ними (Приложение F.3). Используемые при этом подходы отличаются от задач о прямоугольных ямах или барьерах (разд. 2.8.1 и 2.6.3) только изменением правил шивки.

- 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 отражённая волна небольшой амплитуды. Это явление (*надбарьерное отражение*) рассмотрено в приложении § F.4.

### 6.5.1. Теория $\alpha$ -распада

Квазиклассическое приближение позволяет снова получить формулу (2.52), где новым является лишь квазиклассическое выражение для коэффициента туннелирования  $D$  — см. Приложение F.2.2. Отсюда получается ставшее ныне классическим решение **задачи об  $\alpha$ -распаде атомного ядра** с первоначальным зарядом  $Ze$  (теория *Мандельштама–Гамова*). В этой теории предполагается, что в ядре можно выделить  $\alpha$ -частицу (ядро атома гелия  ${}^4_2\text{He}$ ), 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  $\alpha$ -частицы в яме составила бы  $E > 0$ . Вне ядра  $\alpha$ -частица движется в кулоновском поле ядерного остатка, это взаимодействие описывается потенциалом  $U(r) = \beta/r$ , где  $\beta = 2(Z - 2)e^2$ .

При  $E \ll \beta/a$  коэффициент туннелирования

$$D = \exp(-2\pi\sqrt{2m\beta^2/(\hbar^2 E)}).$$

Множитель  $T_{\text{кл}}$  зависит от энергии значительно слабее, для его оценки можно аппроксимировать поле ядра с массой, равной  $A$  массам протона, моделью прямоугольной (радиальной) ямы с радиусом  $a \sim 1,1A^{1/3}$  фм и глубиной несколько МэВ. В итоге связь между временем жизни ядра и энергией  $\alpha$ -частицы (2.52) записывается в виде закона Гейгера–Нетолла

$$\log_{10}(\tau/1\text{sec}) = a + b/\sqrt{E}. \quad (6.17)$$

Для тяжёлых ядер  $b \approx 130 \div 150 \text{ МэВ}^{1/2}$ ,  $a \approx -50$ . Такая сильная зависимость от энергии вылетевшей  $\alpha$ -частицы (энергии уровня)  $E$  подтверждена опытом. В соответствии с (6.17), при увеличении  $E$  от 4 до 9 МэВ время жизни падает на 20 порядков, с  $10^8$  лет до  $10^{-5}$  с (для таких различий отклонения даже в десятки раз не очень существенны).

◇ Задача о вылете электронов из металла («холодная эмиссия») описывается подобным вычислением для потенциала ( $U_o$  — работа выхода) — см. задачу 6.3:

$$U = \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0 \\ U_o - |e|\mathcal{E}x & \text{при } x > 0 \end{cases}. \quad (6.18)$$

## § 6.6. Задачи

*Все задачи — для квазиклассического приближения*

1. Найти уровни энергии и волновые функции:
  - а) для осциллятора; б) для атома водорода;
  - в) для частицы в поле тяжести над непроницаемой плитой.
2. Вычислить коэффициенты  $A$  и  $B$  в законе Гейгера–Нетолла (6.17) для  $^{238}\text{U}$  с радиусом ядра  $\sim 7 \text{ fm}$ ,  $E \approx 2 \text{ МэВ}$ ,  $U_{\text{max}} - E \approx 12 \text{ МэВ}$ , расстояние между точками поворота  $b - a \approx 3 \cdot 10^{-12} \text{ см}$ . Сравнить с известным периодом полураспада урана 4,5 млрд лет.
3. Вычислить коэффициент прохождения электронов через поверхность металла под действием сильного электрического поля  $\mathcal{E}$  — холодная эмиссия (потенциал (6.18)). Найти границы применимости расчёта. Оценить плотность тока через поверхность металла при  $U_o \sim 2 \text{ эВ}$ ,  $\mathcal{E} \sim 10^6 \text{ В/см}$ .
4. Найти коэффициент прохождения в поле  $U(x) = -m\omega^2 x^2/2$ .

5. Оценить число уровней в яме с потенциалом  $U(x)$ , имеющим вид

$$(a) -g^2 e^{-x/a} \theta(x), \quad (b) f \cdot (|x| - a) \theta(a - |x|),$$

$$(c) \frac{k(x^2 - a^2)}{2} \theta(a - |x|), \quad (d) \left( \frac{\beta}{a} - \frac{\beta}{x} \right) \theta(a - x) \theta(x).$$

6. Найдите положение и ширину квазистационарных уровней в полях

$$(a) V = \begin{cases} -V_1 & \text{при } |x| < a, \\ V_2 & \text{при } a < |x| < a + b, \\ 0 & \text{при } |x| > a + b; \end{cases}$$

$$(b) V = \begin{cases} a|x| & \text{при } |x| < \ell, \\ a\ell + b(\ell^2 - x^2) & \text{при } |x| > \ell; \end{cases}$$

$$(c) V = a|x| - bx^2, \quad (d) V = \{\infty \text{ при } x < 0, G\delta(x - a) \text{ при } x > 0\},$$

$$(e) V = \frac{m\omega^2 x^2}{2} + Ax^3.$$

Для потенциала (а) вычислить также коэффициент прохождения, считая, что при  $b \rightarrow 0$  появляется виртуальный уровень при небольшой энергии (§ 2.8). 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  $\Gamma_n$  и сравнить с выражением (2.52). Для потенциала (е) считать выполненным условие применимости теории возмущений при невозмущённом потенциале осциллятора ( $A \ll \hbar\omega x_o^3$ ).

7. Для гармонического осциллятора  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$  с возмущением  $V = A\hbar\omega(x/x_o)^3$  (5.11) вычислить время жизни в состоянии с небольшим  $n$ , выразить его через высоту барьера и сравнить со сдвигом уровней по теории возмущений.

## Глава 7

### Периодическое поле.

### Кристаллические цепочки

В этой главе мы изучим движение частицы в цепочке повторяющихся потенциальных центров на прямой (в одномерном кристалле), и основы динамики таких цепочек, как основу для понимания многих черт физики твёрдого тела.

Число ячеек в наблюдаемых решётках обычно очень велико, и естественно надеяться, что физические результаты слабо зависят от деталей граничных условий. В то же время наборы состояний в периодической решётке и в конечной решётке различаются. Стационарные состояния частиц в решётке конечных размеров — стоячие волны с фазовыми соотношениями, зависящими от деталей граничных условий. В периодической решётке возникают состояния, сходные с бегущими волнами в бесконечном пространстве. Как и в бесконечном пространстве, стоячие волны можно считать суперпозициями бегущих, и наоборот.

Мы начнём с изучения чисто периодических структур — идеальной бесконечной решётки и кольцевой решётки (с периодическими граничными условиями). В §§ 7.2–7.7 обсуждается движение электрона в периодическом поле. Состояния электрона в решётках с большим, но конечным числом ячеек обсуждаются §§ 7.4, 7.5, 7.7. В § 7.8 рассматриваются колебания одномерной решётки. В § 7.9 перечисляются некоторые типы элементарных возбуждений в твёрдом теле. В § 7.10 обсуждается важный пример — эффект Мёссбауэра.

### § 7.1. Основные понятия

Рассматривается линейная цепочка (*решётка*) из  $N$  повторяющихся элементов — *элементарных ячеек* с периодом (*постоянной решётки*)  $a$ . Обозначим через  $x_n \equiv na$  координату «начала»  $n$ -й ячейки.

Периодическая решётка не меняется при сдвиге на величину постоянной решётки  $a$  — *инвариантна по отношению к таким сдвигам*, т. е. операторы  $\hat{H}$  и  $\hat{T}_a$  коммутируют. Поэтому можно изучать только такие стационарные состояния системы, которые одновременно являются собственными функциями оператора конечного сдвига<sup>1</sup>  $\hat{T}_a$  (1.31):

$$\hat{T}_a \psi(x) \equiv \psi(x + a) = \lambda_T \psi(x), \quad \hat{T}_a = \exp(ia\hat{p}/\hbar). \quad (7.1)$$

Какие же значения может принимать собственное значение  $\lambda_T$  при наличии указанной инвариантности?

Если  $|\lambda_T| \neq 1$ , то вероятности пребывания в соседних ячейках решётки 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  $q$ ,

$$\lambda_T = e^{iqa}. \quad (7.2)$$

Величину  $\hbar q$  (а нередко и величину  $q$ ) называют *квазиимпульсом*.

В (кольцевой) цепочке из  $N$  ячеек для волновой функции выполняется условие периодичности:

$$\psi(x_n + Na) = \psi(x_n). \quad (7.3a)$$

Подстановка сюда (7.1) показывает, что реализуются только такие значения квазиимпульса, для которых

$$\lambda_T^N \equiv e^{iqNa} = 1 \Rightarrow q = 2\pi r / (Na), \quad r — \text{целое}. \quad (7.3b)$$

Изменение  $q$  на величину, кратную  $2\pi/a$ , не меняет фактор периодичности  $\lambda_T$ . Стало быть, физически осмысленный интервал изменения квазиимпульса имеет длину  $2\pi\hbar/a$ . *Принято* определять квазиимпульс в интервале

$$q \in (-\pi/a, \pi/a] \Rightarrow r \in (-N/2, N/2). \quad (7.4)$$

<sup>1</sup>Периодичность **не требует** совпадения волновых функций в разных ячейках.

Таким образом, **число различных значений квазиимпульса (в дальнейшем — число уровней в зоне) совпадает с числом элементарных ячеек кристалла  $N$** . Когда это число очень велико, говорят о непрерывном изменении  $q$  в интервале (7.4).

∇ 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  $\hbar q_1 + \hbar q_2 - 2\pi\hbar/a$ . 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 квазиимпульсов называют сложением *с перебросом*.

## § 7.2. Движение в периодическом поле. Общее описание

Ниже мы изучим движение электрона в периодическом поле

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x); \quad U(x+a) = U(x). \quad (7.5)$$

При  $x \rightarrow \pm\infty$  взаимодействие не исчезает, и нет оснований выбирать начало отсчёта потенциала так, чтобы в этом пределе потенциал  $U \rightarrow 0$ .

• **Функции Блоха.** Перепишем общую собственную функцию операторов конечного сдвига и энергии в виде  $\psi = e^{iqx}u_q(x)$ . Из (7.1), (7.2) следует, что *блеховская амплитуда*  $u_q(x)$  — периодическая функция:

$$\psi = e^{iqx}u_q(x); \quad u_q(x+a) = u_q(x), \quad \left( \int_0^a |u_q(x)|^2 dx = 1 \right). \quad (7.6)$$

(Здесь выписана также обычная нормировка блеховских амплитуд — на ячейке.) Для вычисления этой амплитуды достаточно использовать решение уравнения Шредингера на одной ячейке

$$\hat{H}e^{iqx}u_{qn}(x) = E_n(q)e^{iqx}u_{qn}(x). \quad (7.7)$$

(Значок  $q$  отмечает величину квазиимпульса, а  $n$  — порядковый номер решения при данном  $q$ .)

Набор функций Блоха  $e^{iqx}u_{qn}(x)$  полон. По этим функциям можно разложить произвольную волновую функцию электрона в кристалле:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{q,n} b_{qn} e^{iqx} u_{qn}(x). \quad (7.8)$$

### § 7.3. Формирование зон

Пусть потенциал состоит из  $N$  одинаковых ячеек произвольной формы.

#### 7.3.1. Матрица перехода

При заданной энергии  $E$  уравнение Шредингера на ячейке имеет два линейно независимых решения, обозначим их  $\phi_1(x, E)$  и  $\phi_2(x, E)$ , где  $x$  отсчитывается от левого края ячейки<sup>1</sup>. Общее решение для  $n+1$ -й ячейки имеет вид

$$\psi(x, E)|_{na < x < (n+1)a} = c_1^{(n)} \phi_1(x - na, E) + c_2^{(n)} \phi_2(x - na, E). \quad (7.9)$$

Выпишем условия сшивки на границе первых двух ячеек

$$\psi(a - 0) = \psi(a + 0), \quad \psi'(a - 0) = \psi'(a + 0).$$

Подставляя сюда выражения (7.9), запишем эти условия в виде матричного соотношения:

$$\hat{A} \begin{pmatrix} c_1^{(1)} \\ c_2^{(1)} \end{pmatrix} = \hat{B} \begin{pmatrix} c_1^{(2)} \\ c_2^{(2)} \end{pmatrix}, \quad \hat{A} = \begin{pmatrix} \phi_1(a) & \phi_2(a) \\ \phi_1'(a) & \phi_2'(a) \end{pmatrix}, \quad \hat{B} = \begin{pmatrix} \phi_1(0) & \phi_2(0) \\ \phi_1'(0) & \phi_2'(0) \end{pmatrix}.$$

Отсюда следует

$$\begin{pmatrix} c_1^{(2)} \\ c_2^{(2)} \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} c_1^{(1)} \\ c_2^{(1)} \end{pmatrix}, \quad \text{где } \hat{T} = \hat{B}^{-1} \hat{A} \equiv \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix}. \quad (7.10)$$

Определители матриц  $\hat{B}$  и  $\hat{A}$  это вронскианы  $W(x) = \phi_1 \phi_2' - \phi_2 \phi_1'$  (2.13) взятые при  $x = a$  и  $x = 0$ . Поскольку  $W(a) = W(0)$ , то  $\det(\hat{T}) = 1$ .

• Матрица перехода  $\hat{T}$  (*transfer matrix*)<sup>2</sup> реализует оператор конечного сдвига (7.1) на пространстве собственных функций нашего потенциала, а её собственные значения  $\lambda_{1,2}$  — обсуждавшиеся выше собственные значения этого оператора при заданной энергии  $E$ . Эти собственные значения зависят от вида потенциала, они определяются из

<sup>1</sup>Для удобства записи мы считаем, что каждая ячейка начинается и кончается хотя бы ничтожным участком свободного движения с  $V = 0$ . При этом на границах ячейки и волновая функция и её производная непрерывны; удобно также выбирать решения, стартуя с форм  $\phi_{1,2} = e^{\mp \kappa x} \forall (0 < x < \varepsilon)$ .

При практических вычислениях идейно проще использовать для потенциала в гамильтониане выражение, отвечающее полю в уединённой изучаемой ячейке. Однако, можно включить в этот потенциал и «крылья» вкладов ионов из соседних ячеек и, кроме того, использовать результаты численного интегрирования.

<sup>2</sup>См. например [6].

квадратного уравнения

$$\lambda^2 - 2\Lambda(E)\lambda + \det(\hat{T}) = 0, \quad \Lambda(E) = \text{Tr}(\hat{T})/2. \quad (7.11)$$

Прямой расчёт даёт:

$$\Lambda(E) = \frac{\phi_1(0)\phi_2'(a) + \phi_1(a)\phi_2'(0) - \phi_2(0)\phi_1'(a) - \phi_2(a)\phi_1'(0)}{4W(0)}.$$

Поскольку без ограничения общности решения  $\phi_1$  и  $\phi_2$  можно выбрать действительными, то  $\Lambda(E)$  — действительная величина<sup>1</sup>. С учётом того, что детерминант  $\det(T) = 1$ , уравнение (7.11) принимает вид

$$\lambda^2 - 2\Lambda(E)\lambda + 1 = 0 \Rightarrow \lambda_1 \cdot \lambda_2 = 1, \quad \lambda_1 + \lambda_2 = 2\Lambda(E). \quad (7.12)$$

Диагонализация матрицы  $\hat{T}$  даёт

$$\hat{T} = \hat{R}^{-1}\hat{V}\hat{R}, \quad \text{где } \hat{V} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}. \quad (7.13)$$

Для цепочки из  $N$  ячеек, получается, очевидно,

$$\begin{pmatrix} c_1^{(N+1)} \\ c_2^{(N+1)} \end{pmatrix} = \hat{T}^N \begin{pmatrix} c_1^{(1)} \\ c_2^{(1)} \end{pmatrix} \equiv \hat{R}^{-1}\hat{V}^N\hat{R} \begin{pmatrix} c_1^{(1)} \\ c_2^{(1)} \end{pmatrix}.$$

∇ Если  $|\Lambda(E)| > 1$ , то числа  $\lambda_i \equiv \Lambda \pm \sqrt{\Lambda^2 - 1}$  действительны, для определённости мы выберем  $|\lambda_1| > 1$ , тогда  $|\lambda_2| < 1$ .

∇ Если  $|\Lambda(E)| \leq 1$ , то числа  $\lambda_i$  комплексны и по абсолютной величине равны 1 (поскольку  $\lambda_1\lambda_2 = 1$ ), обозначим  $\lambda_1 = e^{iqa}$ . Тогда  $\lambda_2 = e^{-iqa}$ . В решении естественным образом появился уже известный нам квазиимпульс  $q$ . При этом

$$\lambda_1 + \lambda_2 = e^{-iqa} + e^{iqa} = \boxed{2 \cos(qa) = 2\Lambda(E)}. \quad (7.14)$$

Ясно, что небольшому изменению  $E$  отвечает и небольшое изменение  $\Lambda(E)$ . Значения  $E$ , для которых выполнено условие  $|\Lambda(E)| \leq 1$ , образуют непрерывные области — разрешённые энергетические зоны.

<sup>1</sup>Изменение базиса не меняет определитель и след матрицы. Поэтому результаты сохраняются и при использовании более удобного для некоторых задач базиса с комплексными  $\phi_i$ .

Эти зоны чередуются с *запрещёнными энергетическими зонами*, которые определяются условием  $|\Lambda(E)| \geq 1$ .

Это описание хорошо иллюстрируется наблюдениями при компьютерном моделировании периодической структуры. Поучительно наблюдать переход к этим зонам от набора энергетических уровней и от появления областей почти полного прохождения (и отражения) в наборе повторяющихся одинаковых ям при росте числа этих ям (прил. А).

• **Закон дисперсии. Теорема Крамерса.** Соотношение (7.14) можно читать как уравнение для определения зависимости энергии от квазиимпульса  $q$  — *закона дисперсии*  $E(q)$ . Видно, что при одном значении энергии реализуются два решения, с квазиимпульсами  $q$  и  $-q$ , т. е. собственные состояния гамильтониана двукратно вырождены (как и при свободном движении) — *теорема Крамерса*<sup>1</sup>:

$$E(-q) = E(q). \quad (7.15)$$

• **Эффективная масса.** При  $N \rightarrow \infty$ , величину  $q$  можно рассматривать как непрерывную переменную. По теореме Крамерса (7.15), в зависимости  $E$  от  $q$  значение  $q = 0$  отвечает экстремуму, и при  $qa \ll 1$  можно записать

$$E(q) = E_0 + \hbar^2 q^2 / 2m^*. \quad (7.16)$$

Коэффициент  $m^*$  называют *эффективной массой*. Если  $m^* < 0$ , говорят об отрицательных массах и о *дырках* (вместо электронов). В большинстве случаев величина  $|m^*|$  близка к массе электрона  $m_e$ , в разных кристаллах  $|m^*|$  принимает значения от  $\pm 0,05 m_e$  до  $\pm 100 m_e$ .

• В трёхмерном случае работают и понятие о функциях Блоха (7.6) и теорема Крамерса (7.15). А вот эффективная масса в силу анизотропии кристалла может быть разной для разных направлений. Иногда анизотропия кристалла делает более удобным использовать отличные от (7.16) формы закона дисперсии вблизи  $q = 0$  (как в Ge).

• **Вектор плотности тока вероятности.** Подставляя в (2.4) волновую функцию (7.9), с учётом действительности  $\phi_i$  найдем ( $k = 1, 2$

<sup>1</sup>Получим эту теорему ещё одним способом. Запишем уравнение, комплексно сопряжённое к уравнению Шредингера (7.7)  $\hat{H}^\dagger e^{-iqx} u_{qn}^*(x) = E_n(q) e^{-iqx} u_{qn}^*(x)$ , и уравнение для состояния, получающегося из исходного заменой  $q \rightarrow -q$ , оно имеет вид:  $\hat{H} e^{-iqx} u_{-qn}(x) = E_n(-q) e^{-iqx} u_{-qn}(x)$ . Поскольку  $\hat{H}$  — эрмитов оператор, каждое из этих уравнений определяет собственные функции одних и тех же операторов — гамильтониана и конечного сдвига. Поэтому эти функции совпадают, и, стало быть, имеют место (7.15) и соотношение  $u_{-qn}(x) = u_{qn}^*(x)$ .

– номер собственного вектора):

$$j_k = -\frac{i\hbar}{2m} \left[ \psi^* \frac{d\psi}{dx} - \frac{d\psi^*}{dx} \psi \right] = \frac{\hbar \cdot \text{Im} \left( c_1^{(n)} c_2^{(n)*} \right)}{m} W(x). \quad (7.17)$$

Поскольку вронскиан  $W(x)$  не зависит от координат, плотность тока постоянна. Таким образом, найденные решения описывают частицы, распространяющиеся по периодической решётке без затухания, их закон дисперсии может заметно отличаться от  $\varepsilon = p^2/2m$ .

### 7.3.2. Периодические граничные условия

Рассмотрим решётку из  $N$  ячеек с периодическими граничными условиями. Это означает, что  $N + 1$ -я ячейка совпадает с первой, и условие однозначности волновой функции можно записать в виде

$$\hat{T}^N \equiv \hat{R}^{-1} \begin{pmatrix} \lambda_1^N & 0 \\ 0 & \lambda_2^N \end{pmatrix} \hat{R} = \mathbb{I}. \quad (7.18)$$

При таких энергиях  $E$ , когда  $\Lambda(E) > 1$ , получается  $\lambda_1 > 1$ ,  $\lambda_2 < 1$ . Поэтому условие периодичности (7.18) не может выполняться, собственных состояний гамильтониана не существует. Это энергия принадлежит *запрещённой энергетической зоне*.

Обсуждение в § 7.1 относится к случаю  $\Lambda(E) < 1$ . В этом случае можно удовлетворить условие периодичности (7.18), выбрав значения квазиимпульса, отвечающие (7.14) и такие, что  $e^{iNqa} = 1$ , т. е.  $Nqa = 2\pi r$ , где  $r$  — целое число (7.3b). В частности, для кольцевой решётки, содержащей одну ячейку, «периодичность» имеет место только при  $qa = 0$ . При  $N > 1$  периодичность имеет место при значениях  $q = (2\pi/a)(r/N)$ . С ростом  $N$  эти значения сближаются друг с другом, при  $N \rightarrow \infty$  они сливаются в *разрешённую энергетическую зону*. Получившиеся при соответствующих значениях энергии собственные векторы (7.13) являются общими собственными векторами гамильтониана и оператора конечного сдвига, отвечающими одной энергии и разным знакам квазиимпульса<sup>1</sup>. Решения, отвечающие разным знакам квазиимпульса отвечают движению электрона в положительном или отрицательном направлениях на решётке.

<sup>1</sup>При  $N = 6$  подход хорошо описывает кольцевую молекулу бензола  $C_6H_6$ .

### 7.3.3. Примеры

Два важных предельных случая, в определение которых входят как характеристики самой решётки, так и значение энергии частицы, допускают сравнительно простое исследование вне зависимости от деталей зависимости потенциала от координат и полезны для многочисленных приложений. Они обсуждаются в § 7.5. Мы предпошлём их анализу детальное изучение зон, получающихся при различных известных формах потенциала. Наиболее интересны для приложений нижние разрешённые зоны.

• **«Забор» из  $\delta$ -ям (модель Кронига–Пенни).**

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} - G \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + na - \varepsilon), \quad k_0 = mG/\hbar^2 > 0. \quad (7.19)$$

Здесь  $\varepsilon$  — малая вспомогательная величина, указывающая, что граница между ячейками расположена там, где потенциал гладкий. В ответе мы устремим  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

◆ При  $E < 0$  выберем  $\phi_1(x, E) = e^{\varkappa x}$  и  $\phi_2(x, E) = e^{-\varkappa x}$  с волновой функцией вида (7.9). Простое применение условий шивки (2.15) на  $\delta$ -яме позволяет получить коэффициенты  $c_1^{(2)}$  и  $c_2^{(2)}$  с другой стороны ямы, а к концу ячейки, в точке  $x = a - 0$ , эти коэффициенты приобретают дополнительные множители  $e^{\varkappa a} = 1/\sqrt{D}$  в левом столбце или  $e^{-\varkappa a} = \sqrt{D}$  — в правом. (Величина  $D = e^{-2\varkappa a}$  представляет собой коэффициент туннелирования между соседними ямами.) Получившаяся матрица перехода (7.10) имеет вид<sup>1</sup>

$$T = \begin{pmatrix} \left(1 - \frac{k_0}{\varkappa}\right) e^{\varkappa a} & -\frac{k_0}{\varkappa} e^{-\varkappa a} \\ \frac{k_0}{\varkappa} e^{\varkappa a} & \left(1 + \frac{k_0}{\varkappa}\right) e^{-\varkappa a} \end{pmatrix}, \quad D = D_f \equiv e^{-2\varkappa a}. \quad (7.20)$$

<sup>1</sup>Ввиду важности примера, приведём и другое решение этой задачи при  $E < 0$ .

Отыскиваются решения уравнения Шредингера, которые являются и собственными функциями оператора конечного сдвига  $\hat{T}_a$ . Для  $x \in (0, a)$  мы используем решение  $\psi^{(1)}(x, E) = c_1 \phi_1(x, E) + c_2 \phi_2(x, E)$  (7.9) с  $\phi_1(x, E) = \text{sh } \varkappa(a - x)$  и  $\phi_2(x, E) = \text{sh } \varkappa x$ . Для  $x \in (a, 2a)$  имеем  $\psi^{(2)}(x, E) = e^{iqa} \psi^{(1)}(x - a, E)$ , где квазиимпульс  $q$  подлжит определению. Из непрерывности волновой функции при  $x = a$  получается  $c_2 = c_1 e^{iqa}$ . Далее, из условия шивки (2.15) получается (7.21(a)).

Случай положительной энергии  $E > 0$  получается из (7.20) простой заменой  $\varkappa \rightarrow ik \equiv i\sqrt{2mE/\hbar^2}$  и  $X = \varkappa a \rightarrow Y = ka$ .

Закон дисперсии (7.14)  $\cos qa = \Lambda(E)$  принимает вид ( $g = k_0 a$ )

$$\cos qa = \begin{cases} \operatorname{ch} X - \frac{g}{X} \operatorname{sh} X, & X = \varkappa a \text{ при } E < 0, & (a) \\ \cos Y - \frac{g}{Y} \sin Y, & Y = ka \text{ при } E > 0. & (b) \end{cases} \quad (7.21)$$

◆ *Нижняя разрешённая зона.*

∇ Когда энергия равна энергии уровня уединённой «родительской» ямы  $E_g$ , т. е.  $\varkappa = k_0$  (2.25), матрица (7.20) принимает вид

$$T = \begin{pmatrix} 0 & e^{-g} \\ -e^g & 2e^{-g} \end{pmatrix}, \quad (7.22)$$

уравнение (7.21(a)) принимает вид  $\cos qa = e^{-g} = \sqrt{D}$ . Это уравнение для определения квазиимпульса всегда имеет решение. Таким образом, *нижняя разрешённая зона окружает уровень энергии уединённой «родительской» ямы.* В решётке эта энергия отвечает  $q \neq 0$ .

∇ Чтобы найти нижнюю границу зоны, достаточно взять  $q = 0$  в уравнении (7.21(a)). При этом уравнение принимает вид  $\operatorname{th}(X/2) = g/X$ . Верхняя граница зоны получается из того же уравнения при  $qa = \pm\pi$ , тогда оно принимает вид  $\operatorname{th}(X/2) = X/g$ . Последнее уравнение имеет (единственное) ненулевое решение только при  $g = k_0 a > 2$  (т. е.  $D < 0,135$ ) (сравните наклоны кривой  $\operatorname{th}(X/2)$  и прямой  $X/g$  вблизи начала координат). При меньших значениях  $g$  разрешённая зона заходит в область положительных энергий, её граница определяется из (7.21(b)), при малых  $g$  это  $ka \approx \pi - 2g/\pi$ . Итак, *в нашей модели* при отрицательных энергиях есть единственная разрешённая зона, может быть, выходящая в область положительных энергий.

∇ Малые значения  $g \ll 1$  отвечают случаю слабой связи, разд. 7.5.2. При этом из уравнения  $\operatorname{th}(X/2) = g/X$  получаются нижняя граница зоны  $X_n = \sqrt{2g} \Rightarrow E_n = -\hbar^2 k_0 / (2ma) \equiv -G/(2a)$  и эффективная масса  $m^* = m$ .

∇ С ростом величины  $g$  коэффициент туннелирования  $D$  уменьшается, а с ним уменьшается и ширина нижней разрешённой зоны, при  $g \rightarrow \infty$  границы зоны приближаются к значению энергии уединённой ямы  $k_0$ . Эта возможность отвечает случаю сильной связи, рассмотрен-

ному в разд. 7.5.1, где вычислены и значения массы и ширины нижней зоны в этом случае, пригодные для разных форм потенциала.

◆ *Зоны при большой энергии электрона*  $Y = ka \gg g = k_0 a$ .

▽ *Закон дисперсии вдали от границ зоны.* При  $Y \gg g$  и  $n \gg 1$  в большей части области изменения квазиимпульса вторым слагаемым в правой части (7.21(b)) можно пренебречь, и уравнение принимает вид

$$\cos qa \approx \cos ka \Rightarrow$$

$$k = |q| \pm \frac{\pi n}{a} + \dots \Rightarrow E = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m} \pm \frac{\pi n \hbar^2 |q|}{m} + \mathcal{O}\left(\frac{\hbar^2 q^2}{2m}, \frac{mG^2}{2\hbar^2}\right). \quad (7.23)$$

Знак модуля в правой части обеспечивает выполнение теоремы Крамерса (7.15).

Вблизи границ зоны, где  $\cos qa = \pm 1$ , учёт второго слагаемого правой части (7.21(b)) может вывести её за пределы допустимой области  $(-1, 1)$  значений  $\cos qa$ , здесь возникают запрещённые зоны.

▽ *Границы зон.* Границам зон отвечают значения  $\cos qa = \pm 1$ .

Рассмотрим сначала границу, отвечающую  $q = 0$ . На этой границе уравнение (7.21(b)) принимает вид  $\cos(ka) - \frac{g}{ka} \sin(ka) = 1$ . Если отбросить второе слагаемое, отсюда получается  $ka = 2\pi n$  с целым  $n \gg 1$ . Наличие второго слагаемого приводит к небольшому изменению этого ответа  $\bar{ka} \Rightarrow ka = 2\pi n + \delta$  с  $|\delta| \ll 1$ . Раскладывая правую часть по  $\delta$  и удерживая главные члены разложения, мы получаем справа  $1 - \frac{\delta^2}{2} - \frac{g}{2\pi n} \delta$ . Это выражение превосходит 1 при  $\frac{\delta^2}{2} + \frac{g}{2\pi n} \delta < 0$ , т. е. условия  $0 > \delta > -g/(\pi n)$  определяют границы запрещённой зоны в окрестности точки  $ka = 2\pi n$ . Точно такое же рассуждение для границы  $q = \pm\pi/a$ , где  $\cos qa = -1$ , с выбором  $ka = (2n + 1)\pi + \bar{\delta}$  даёт для границ запрещённой зоны ту же формулу, что и выше с заменой  $2n \rightarrow (2n + 1)$ . В итоге получается, что значения  $k$  в интервалах

$$\frac{\pi n}{a} > k > \frac{\pi n}{a} - \frac{2g}{\pi n a} \Rightarrow \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} > E > \frac{\hbar^2}{2ma^2} (\pi^2 n^2 - 4g). \quad (7.24)$$

принадлежат запрещённым зонам<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Для «забора» из  $\delta$ -горбов результаты воспроизводятся с естественной сменой знака неравенств и знака  $g$ .

Присвоим номер  $n$  разрешённой зоне с волновыми числами между  $k = \pi n/a$  и  $\pi(n+1)/a$  (для наименьшей зоны  $n = 0$ ). С ростом энергии разрешённые зоны заполняют почти всю полупрямую  $Y = ka$ , ширины этих зон растут как  $\Delta E_n = (\pi^2 \hbar^2)(2n+1)/(2ma^2)$ .

▽ Чтобы вычислить эффективную массу  $m^*$  в каждой зоне, достаточно разложить по малым отклонениям от границы зоны обе стороны уравнения (7.21(b)) при  $q \rightarrow 0$ . Простые вычисления, подобные тем, что выполнялись для получения границ запрещённых зон, дают ( $n \gg 1$ )

$$m^* = (-1)^n \frac{2mg}{\pi^2 n^2}. \quad (7.25)$$

Итак, в зонах с чётным  $n$  квазиимпульс обращается в нуль на дне зоны, и эффективная масса положительна. Они чередуются с зонами, для которых квазиимпульс обращается в нуль на «потолке» зоны (эффективная масса отрицательна).

• **Ячейка — прямоугольная яма** глубиной  $-V$  и шириной  $b$ , расстояние до следующей ямы  $-(a-b)$ , ср. (2.20), (2.39a).

Обозначим, как обычно,  $k_0 = \sqrt{2mV/\hbar^2}$ ,  $k_1 = \sqrt{2m(E+V)/\hbar^2}$ ,  $z = k_1 b$ . Кроме того, при  $E > 0$  обозначим  $k = \sqrt{2mE/\hbar^2}$ ,  $U = k(a-b)$ , а при  $E < 0$  используем  $\varkappa = \sqrt{2m|E|/\hbar^2} (= ik)$  и  $X = \varkappa(a-b)$ .

Простые, но громоздкие вычисления дают при  $E > 0$  (*студент Затримайлов*)

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} \left( \cos z - i \frac{k^2 + k_1^2}{2kk_1} \sin z \right) e^{-iU} & i \frac{k_0^2}{2kk_1} \sin z e^{iU} \\ -i \frac{k_0^2}{2kk_1} \sin z e^{-iU} & \left( \cos z + i \frac{k^2 + k_1^2}{2kk_1} \sin z \right) e^{iU} \end{pmatrix}. \quad (7.26)$$

Случай  $E < 0$  получается естественной заменой переменных.

В итоге получается уравнение для закона дисперсии

$$\cos qa = \begin{cases} \cos z \operatorname{ch} X - \frac{k^2 + k_1^2}{2kk_1} \sin z \operatorname{sh} X & \text{при } E < 0, \quad (a) \\ \cos z \cos U - \frac{k^2 + k_1^2}{2kk_1} \sin z \sin U & \text{при } E > 0. \quad (b) \end{cases} \quad (7.27)$$

$$X = \varkappa(a-b), \quad U = k(a-b), \quad z = k_1 b.$$

Легко проверить, что при подстановке соотношения для уровней энергии «материнской» ямы (2.21a) в уравнение (7.27(a)) справа получают выражения, меньшие 1 по абсолютной величине, т. е. уровни энергии «материнской» ямы лежат в пределах разрешённых зон. Читателю предлагается самостоятельно определить границы этих зон.

Для больших энергий картина слабо отличается от случая модели Кронига–Пенни. Чтобы убедиться в этом, мы запишем в (7.27(b))  $\cos z \cos U = \cos(z+U) + \sin z \sin U$ . После естественных переобозначений

$$\varepsilon \equiv k_1 - k = k_0^2 / (k_1 + k) \ll 1, \quad U + z = ka + \varepsilon b$$

уравнение (7.27(b)) принимает вид:

$$\cos(qa) = \cos(ka + \varepsilon b) - \frac{\varepsilon^2}{2kk_1} \sin z \sin U. \quad (7.28)$$

В стороне от границ зон это уравнение совпадает (7.21(b)) с точностью до малых поправок. Поэтому грубая картина закона дисперсии совпадает с (7.23), узкие запрещённые зоны возникают вблизи границ  $k = \pi n/a$ . Выражения же для границ зон и эффективной массы видоизменяются по сравнению с (7.24), (7.25).

• **Другие потенциалы. Приближённые вычисления.**

В реальных задачах аналитическая форма решений уравнения Шредингера не вычисляется, соответственно не вычисляется аналитическая форма матрицы перехода, и приходится использовать приближённые методы. Возникает естественное опасение, что погрешности приближённых вычислений на одной ячейке будут усиливаться при их тиражировании (при увеличении числа ячеек), и окончательный результат окажется далёким от реальности.

Излагаемый метод основан на использовании матрицы перехода, определённой на одной ячейке, тиражирование ячеек не вносит новых погрешностей. Поэтому исследовать свойства зон для конкретной физической задачи можно, приближённо решая уравнение Шредингера на отдельной ячейке (если необходимо, с учётом искажений поля, вносимых соседями). Это открывает возможности надёжного использования приближённых вычислений для ячеек любого вида.

• **Решётка с плавно меняющимся потенциалом ячейки в условиях применимости квазиклассического описания ([17],**

задача 2-11). Для удобства обозначений за левую границу ячейки принята левая точка поворота,  $a_0$  — правая точка поворота. Применение правил шивки (6.13) даёт в этом случае

$$T = \begin{pmatrix} 2 \cos \sigma / \sqrt{D} & -\sqrt{D} \sin \sigma \\ \sin \sigma / \sqrt{D} & \sqrt{D} \cos \sigma \end{pmatrix}; \quad (7.29)$$

$$\sigma = \int_0^{a_0} p(x) dx / \hbar, \quad D = D_{qcl} \equiv e^{-2 \int_{a_0}^a \sqrt{2m(U(x)-E)} dx / \hbar}.$$

Получающийся закон дисперсии при  $N \rightarrow \infty$  имеет вид

$$\cos qa = (1/\sqrt{D} + \sqrt{D}/4) \cos \sigma. \quad (7.30)$$

- Для движения в поле  $U(x) = A \cos(2\pi x/a)$  уравнение Шредингера сводится к уравнению Матъе, подробно изучаемому в курсах механики при описании модели параметрического резонанса [2, 16, 25, 26].

#### § 7.4. От бесконечной решётки к конечной. Цепочка со свободными концами

**Цепочка со свободными концами** — решётка из  $N$  одинаковых ячеек с  $U(x) = 0$  при  $x < 0$  и при  $x > (N+1)a$ . Всё сказанное о матрице перехода на отдельной ячейке справедливо и в этом случае, а взамен условия периодичности мы изучим эволюцию зависимости коэффициента прохождения от энергии с ростом  $N$ .

- При  $E > 0$  рассуждения разд. 7.3 легко трансформируются в описание прохождения электрона через нашу новую решётку (многое из сказанного можно увидеть с помощью программы Quant на терминале компьютера).

При некоторых значениях энергии решётка становится прозрачной, т. е.

$$\begin{pmatrix} c_1^{(N+1)} \\ c_2^{(N+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1^{(1)} \\ c_2^{(1)} \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{T}^N = \mathbb{I} \Rightarrow \hat{V}^N = \mathbb{I}. \quad (7.31)$$

Для решётки из  $N$  ячеек это условие полной прозрачности совпадает по виду с условием периодичности (7.18).

Обсудим теперь что нового дадут выводы § 7.3 для рассматриваемой задачи.

∇ Если  $|\Lambda(E)| > 1$ , числа  $\lambda_i$  действительны, для определённости мы выберем  $|\lambda_1| > 1$ , тогда  $|\lambda_2| < 1$ . Для одного из собственных состояний матрицы перехода отношение амплитуд слева и справа от какой-нибудь границы ячеек с ростом  $N$  исчезает, как  $\lambda_2^N$ , сигнал не проходит слева направо. Для другого собственного состояния подобное отношение неограниченно растёт (как  $\lambda_1^N$ ). Поэтому сигнал не проходит справа налево. В итоге решётка становится непрозрачной — рождается запрещённая зона. То, сколько ячеек нужно для достижения фактической непрозрачности, зависит от конкретного значения  $\lambda_1$ .

∇ Если  $|\Lambda(E)| \leq 1$ , числа  $\lambda_i$  комплексны и по абсолютной величине равны 1 (поскольку  $\lambda_1 \lambda_2 = 1$ ), обозначим  $\lambda_1 = e^{iqa}$ , тогда  $\lambda_2 = e^{-iqa}$ .

Для решётки, содержащей одну ячейку, полная прозрачность достигается только при  $qa = 0$ . Для решётки из  $N$  ячеек полная прозрачность достигается при  $Nqa = 2\pi r$ , т. е. при значениях  $q = 2(\pi/a)(r/N)$ . С ростом числа ячеек  $N$  число таких точек прозрачности на шкале энергии растёт, эти значения сближаются друг с другом, при  $N \rightarrow \infty$  они сливаются в разрешённую энергетическую зону. Уравнение (7.14) описывает закон дисперсии в разрешённой зоне — зависимость энергии от квазиимпульса  $q$ , её границы определяются уравнениями  $|\Lambda(E)| \leq 1$ .

• При  $E < 0$  за независимые решения для уединённой ямы (по которым строится матрица перехода) удобно взять те, которые вне ямы неограниченно убывают или возрастают. При этом выборе условие существования уровня при энергии  $E = E_k$  сводится к требованию, что из решения, неограниченно убывающего вправо от нашего набора ям ( $e^{-\kappa x}$ ), не получается решения, неограниченно растущего влево от нашего набора ям (та же по форме функция  $e^{-\kappa x}$ ). Иными словами, один из диагональных элементов матрицы  $\hat{T}^N$  обращается в нуль, (ср. (7.22) для  $\delta$ -ямы):

$$\left[ \left( \hat{T}(E) \right)^N \right]_{11} = 0. \quad (7.32)$$

**Математическая вставка**

Построим по матрице перехода  $\hat{T}$  (7.10)–(7.13) вспомогательную матрицу  $\hat{S}(t)$  посредством уравнения с начальным условием  $\hat{S}(0) = 1$ :

$$\frac{d\hat{S}(t)}{dt} = \hat{T}\hat{S}(t) \Rightarrow \hat{S}(t) = e^{\hat{T}t} \equiv \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$$

так, что  $(\hat{T}^N)_{11} = \left[ d^N \hat{S}/dt^N \Big|_{(t=0)} \right]_{11}$ . Вспоминая определение (7.13), запишем наше уравнение в виде  $\frac{d\hat{S}(t)}{dt} = \hat{R}^{-1} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \hat{R}\hat{S}(t)$ . Умножая получившееся уравнение слева на матрицу  $\hat{R}$ , не зависящую от  $t$ , и внося её под знак дифференцирования, мы найдём решение в виде  $\hat{R}\hat{S}(t) = \begin{pmatrix} e^{\lambda_1 t} & 0 \\ 0 & e^{\lambda_2 t} \end{pmatrix} \hat{R}$ , т. е.  $\hat{S}(t) = \hat{R}^{-1} \begin{pmatrix} e^{\lambda_1 t} & 0 \\ 0 & e^{\lambda_2 t} \end{pmatrix} \hat{R}$ . Итак, можно записать  $\hat{S}(t) = \hat{F}e^{\lambda_1 t} + \hat{G}e^{\lambda_2 t}$ , где  $\hat{F}$  и  $\hat{G}$  — матрицы с коэффициентами, не зависящими от  $t$ , так что например  $S_{12} = F_{12}e^{\lambda_1 t} + G_{12}e^{\lambda_2 t}$ . Запишем теперь исходное уравнение в компонентах

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}.$$

Прямое решение уравнений для отдельных компонент с учётом разложения по экспонентам и начального условия даёт нужные нам компоненты решения в виде

$$S_{21} = T_{21} \frac{(e^{\lambda_1 t} - e^{\lambda_2 t})}{\lambda_1 - \lambda_2}, \quad S_{11} = \frac{(\lambda_1 - T_{22})e^{\lambda_1 t} - (\lambda_2 - T_{22})e^{\lambda_2 t}}{\lambda_1 - \lambda_2}.$$

С учётом тождества  $(\hat{T}^N)_{11} \equiv \left[ d^N \hat{S}/dt^N \Big|_{(t=0)} \right]_{11}$  условие (7.32) принимает вид

$$(\hat{T}^N)_{11} = \frac{(\lambda_1 - T_{22})\lambda_1^N - (\lambda_2 - T_{22})\lambda_2^N}{\lambda_1 - \lambda_2} = 0. \quad (7.33)$$

Подставляя в (7.33) выражения  $\lambda_i = e^{\pm iqa}$  и учитывая (7.11), (7.14), преобразуем это соотношение к виду:

$$\frac{\sin[(N+1)qa] - T_{22} \sin(Nqa)}{\sin qa} = 0, \quad \text{где } 2 \cos qa = T_{11} + T_{22}. \quad (7.34)$$

Это — уравнение  $N$ -й степени на величину  $\cos qa$ . В общем случае зависимость элементов матрицы перехода от энергии нам не известна, и это уравнение даёт лишь принципиальное решение задачи. Тем не менее можно сказать, что в каждой непрерывной области энергий, ограниченной условием  $|\Lambda(E)| \leq 1$ , это уравнение имеет, вообще говоря,  $N$  решений, отвечающих расщеплению исходного уровня уединённой ямы на «дочерние» уровни набора ям (как это обсуждалось, например, для пары ям в разд. 2.6.3 и в § F.3). Если одна из границ области, ограниченной условием  $|\Lambda(E)| \leq 1$ , отвечает положительной энергии, то число «дочерних» уровней с  $E < 0$  может оказаться меньше  $N$  — говорят, что некоторые из  $N$  «дочерних» уровней выталкиваются в область положительных энергий.

## § 7.5. Структура решений в некоторых случаях

### 7.5.1. Случай сильной связи

Рассмотрим ситуацию с отрицательной энергией, когда до появления соседей электрон локализовывался в небольшой окрестности иона (отдельной ячейки) размером  $a_0 \ll a$  и его волновая функция быстро убывала при  $x > a$  так, что коэффициент туннелирования между ячейками (интеграл перекрытия с соседями)  $D$  мал. Разрешённая зона получается узкой, в её пределах все появляющиеся величины, кроме величины  $T_{11}$  можно считать постоянными.

• Чтобы избежать ненужных филологических усложнений, будем считать, что между ямами  $U = 0$ , и базисные волновые функции вне ямы имеют вид  $e^{\kappa x}$  и  $e^{-\kappa x}$ , с  $\kappa = \sqrt{2m|E|/\hbar^2}$  так, что коэффициент туннелирования имеет вид  $D = D_f$  (7.20).

Для перехода между краями ямы при энергии  $E$  матрица перехода  $T_V$  имеет вид  $\hat{T}_V = \begin{pmatrix} \theta_{11}(E) & \theta_{12}(E) \\ \theta_{21}(E) & \theta_{22}(E) \end{pmatrix}$ . Переход к следующей границе описывается дополнительным оператором сдвига

$$\hat{T}_a = \begin{pmatrix} e^{\kappa a} & 0 \\ 0 & e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1\sqrt{\sqrt{D}} & 0 \\ 0 & \sqrt{D} \end{pmatrix}$$

так, что полную матрицу перехода  $\hat{T} = \hat{T}_V \hat{T}_a$  можно записать в виде

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} \theta_{11}e^{\kappa a} & \theta_{12}e^{-\kappa a} \\ \theta_{21}e^{\kappa a} & \theta_{22}e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \theta_{11}/\sqrt{D} & \theta_{12}\sqrt{D} \\ \theta_{21}/\sqrt{D} & \theta_{22}\sqrt{D} \end{pmatrix}. \quad (7.35)$$

След этой матрицы  $\Lambda = \theta_{11}/\sqrt{D} + \theta_{22}\sqrt{D}$  при достаточно малых значениях коэффициента туннелирования сводится к первому слагаемому, и дисперсионное соотношение (7.14) принимает вид

$$\theta_{11}(E)/\sqrt{D} = 2 \cos qa. \quad (7.36)$$

Т. к.  $1/D \gg 1$ , то левая часть оказывается меньше 2 по абсолютной величине только при небольших значениях коэффициента  $\theta_{11}(E)$ , т. е. — в силу (7.32) при энергиях  $E$ , близких к энергии «родительского» уровня  $E_k$ . (Мы ещё обозначим для оценок через  $E_r$  энергию ближайшего уровня «материнской» ямы или  $E_r = 0$ , если такого уровня нет.) В этой области можно разложить этот коэффициент по отклонениям от энергии  $E_k$ , записав<sup>1</sup>  $\theta_{11}(E) = C_k(E - E_k)$ . В итоге наш закон дисперсии принимает вид (во втором выражении мы ввели полуширину разрешённой зоны вокруг  $k$ -го уровня  $\Delta\varepsilon_k \equiv (E_{max} - E_{min})/2 = |2\sqrt{D}/C_k|$ ):

$$E - E_k = 2\sqrt{D} \cos qa / C_k \equiv \Delta\varepsilon_k \cos qa. \quad (7.37)$$

Таким образом, закон дисперсии имеет одну и ту же форму для всех зон, ширина зоны  $2\Delta\varepsilon$  мала, а эффективная масса (7.16) велика:

$$\Delta\varepsilon_k \sim \sqrt{D}|E_k - E_r|, \quad m^* \sim \hbar^2 / [(E_k - E_r)a^2\sqrt{D}]. \quad (7.38)$$

(Отклонение центра зоны от энергии, отвечающей «родительскому» уровню, обусловлено отброшенной малой поправкой  $\theta_{22}\sqrt{D}$ , оно — порядка  $D|E_k - E_r|$ .)

∇ Поучительно оценить ещё характерное время  $t_k$  движения между ячейками. Для этого запишем  $t \sim a/v \sim m^*a/(\hbar q)$ . Приняв  $q \sim \pi/a$ , получим  $t_k \sim \hbar/\Delta\varepsilon_k$ .

□ При увеличении коэффициента туннелирования вид закона дисперсии перестаёт быть универсальным (говорят, что в нём проявляются следующие гармоники по квазиимпульсу) по двум причинам. Во-первых, в следе матрицы  $\Lambda$  становится необходимым учитывать второе слагаемое. Во-вторых, становится существенной зависимость коэффициента  $C_k$  от энергии, индивидуальная для каждого уровня и каждого потенциала.

<sup>1</sup>Коэффициент  $C_k$  таков, что  $C_k(E_r - E_k) \sim 1$ . К примеру, для решётки из  $\delta$ -ям анализ уравнения (7.21(a)) даёт  $C_k = 1/2E_k$ , в квазиклассическом случае  $C_k \approx 4\pi/|E_k - E_{k-1}|$ , где  $E_{k-1}$  — энергия соседнего уровня в отдельной ячейке.

• **Уровни энергии в решётке с конечным числом ячеек  $N$ .**

Напомним, что в случае сильной связи величина  $T_{22} \equiv \theta\sqrt{D}$  пренебрежимо мала, и уравнение для уровней энергии (7.34) упрощается, принимая вид  $\frac{\sin((N+1)qa)}{\sin qa} = 0$ . Итак, значения квазиимпульса принимают дискретные значения

$$qa = \frac{m\pi}{N+1} \quad (1 \leq m \leq N). \quad (7.39)$$

Энергии уровней выражаются через ширину зоны  $2\Delta\varepsilon$  прямой подстановкой в закон дисперсии (7.37) получившихся значений (7.37):

$$E_{mk} = E_k + \Delta\varepsilon_k \cos\left(\frac{m\pi}{N+1}\right). \quad (7.40)$$

В частности, эти значения при  $N = 2$  и  $3$  совпадают с теми, что были получены ранее для двух или трёх  $\delta$ -ям (см. (2.29) и задачу 2.15) или для симметричной двойной ямы в квазиклассическом приближении § F.3.

При нечётном  $N$  уравнение (7.40) для  $d = (N+1)/2$  даёт  $E_d = E_k$ . Вычисление для  $N = 3$  в случае  $\delta$ -ям показывает, что отклонение  $E_d - E_k \propto D$ , т. е. это отклонение имеет следующий порядок малости.

### 7.5.2. Случай слабой связи

Случаем слабой связи называют ситуацию, когда взаимодействие электрона с решёткой лишь немного меняет свободное движение частицы почти для всех рассматриваемых энергий. Эта возможность реализуется, когда характерную энергию поля  $\tilde{V}$  можно считать малой. В этом случае почти все значения энергии принадлежат разрешённым зонам и закон дисперсии слабо отличается от случая свободных частиц. Только вблизи границ области изменения квазиимпульса  $q \approx 0$  и  $q \approx \pm\pi/a$  многократные отражения приводят к возникновению запрещённых зон и изменению закона дисперсии. В этой ситуации хорошо работают оптические аналогии.

• **Для быстрых частиц** речь идёт о малости  $\tilde{V}$  по сравнению с энергией частицы  $E$ . Примеры решётки Кронига–Пенни и решётки из прямоугольных ям или барьеров (раздел 7.3.3) при большой энергии хорошо иллюстрируют основные черты случая слабой связи — сходство

закона дисперсии со случаем свободных частиц и узость запрещённых зон — см. (7.23)–(7.25), (7.28).

• **Для медленных частиц** слабая связь реализуется, когда характерная энергия периодического поля  $\tilde{V}$  мала по сравнению с характерной энергией локализации электрона на периоде решётки  $T_a = (\pi\hbar)^2/(2ma^2)$ ,  $\varepsilon = \tilde{V}/T_a \ll 1$ . Эффективная масса в зоне близка к  $m$ , а ширина зоны — к  $T_a$ .

Соответствующие вычисления для модели Кронига–Пенни можно найти на стр. 168. Универсальные вычисления, использующие матрицу перехода в этом случае, нам не известны, и мы используем подход теории возмущений для простейшего случая потенциала  $V = 2V_1 \cos(2bx)$  при  $b = \pi/a$ .

Невозмущённые волновые функции — это плоские волны  $e^{ikx}$  для состояний с энергией  $E(k) = \hbar^2 k^2/2m$ . Согласно формулам теории возмущений (5.8), первая поправка к энергии под действием нашего возмущения обращается в ноль, и энергии состояний меняются лишь во втором порядке:

$$E(k) \rightarrow \tilde{E}(k) = E(k) + \frac{V_1^2}{E(k) - E(k-2b)} + \frac{V_1^2}{E(k) - E(k+2b)}.$$

При  $k \approx \pm b$  один из знаменателей становится малым. В этой области импульсов система *близка к вырождению*, и взамен предшествующего вычисления следует использовать подход разд. 5.5, разработанный для пары близко расположенных уровней  $|k\rangle$  и  $|k-2b\rangle$  при  $k \approx b$  (или  $|k\rangle$  и  $|k+2b\rangle$  при  $k \approx -b$ ). Воспользовавшись (5.23), при  $k \approx b$  получим взамен  $E(k)$  и  $E(k-2b)$  пару уровней:

$$\tilde{E}_{\pm}(k) = \frac{E(k) + E(k-2b) \pm \sqrt{(E(k) - E(k-2b))^2 + 4V_1^2}}{2}. \quad (7.41)$$

При  $k = b$  энергия  $\tilde{E}_+(k)$  имеет минимум, а энергия  $\tilde{E}_-(k)$  — максимум,  $\tilde{E}_+(b) = E(b) + |V_1|$ ,  $\tilde{E}_-(b) = E(b) - |V_1|$ . В итоге значения энергии от  $\tilde{E}_-(0)$  до  $\tilde{E}_-(b)$  образуют *разрешённую зону*, а от  $\tilde{E}_-(b)$  до  $\tilde{E}_+(b)$  — *запрещённую зону* шириной  $2|V_1|$ . Получающаяся при этой диагонализации волновая функция  $\psi_{-(k=b)}(x)$  пропорциональна  $e^{ibx} - e^{-ibx} \propto \sin(bx)$ . Следовательно, при сдвиге на период решётки волновая функция меняет знак,  $\psi_-(x+a) = -\psi_-(x)$ , т. е.  $\lambda_T = -1$ . В силу (7.2) это

значение  $k$  отвечает значению квазиимпульса  $q = b = \pm\pi/a$  — верхнему краю разрешённой зоны.

∇ В отличие от случая быстрых частиц (для которых  $\hbar q \approx \hbar k \pm \pi n$ ), 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,  $\bar{E}(q) = (\hbar q)^2/(2m) + c\varepsilon^2 V_1$  ( $c \sim 1$ ) до тех пор пока квазиимпульс не приближается к границам области периодичности квазиимпульса  $q = \pm b$ . На этих границах закон дисперсии терпит разрыв, возникает запрещённая зона. Зависимость энергии от квазиимпульса ниже и выше границ запрещённой зоны имеет вид функций  $E_-(q)$  и  $E_+(q)$  (7.41).

∇ У нас получилась только одна запрещённая зона, при  $E \approx (\hbar b)^2/(2m)$ . Последующие, более высокие по энергии и более узкие запрещённые зоны обнаруживаются при учёте следующих порядков теории возмущений (или более высоких гармоник потенциала) при значениях волнового числа  $k = \pm nb$ , т. е. при энергиях  $E \approx (\hbar bn)^2/(2m)$ .

## § 7.6. Качественная картина

**Механизмы возникновения зонной структуры** описываются качественно по-разному для положительной и отрицательной энергий.

∇ При положительной энергии мы имеем дело с резонансами на периодической структуре (как при дифракции на решётке или в интерферометре Фабри–Перо). Для некоторых частот (или углов падения) деструктивная интерференция при многократных отражениях и преломлениях делает такой резонатор непрозрачным. В итоге узкие запрещённые зоны возникают и при больших положительных энергиях. На первый взгляд, это нарушает принцип соответствия — *при больших энергиях картина должна совпадать с классической, неровности потенциала не должны быть заметны*. На самом деле при достаточно больших энергиях высокоэнергетические запрещённые зоны исчезают из-за конечности размеров кристалла.

∇ При  $E < 0$  образование зон происходит через *обобществление состояний* множества одинаковых ям, составляющих решётку, как это обсуждалось в § 7.5.1.

Рассмотрим сначала уединённую яму произвольной формы, отвечающую одной ячейке решётки. Пусть в ней существуют уровни энергии (сверху вниз)  $-E_1, -E_2, \dots, -E_k$  (в реальных кристаллах это элек-

тронные 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 — см. § 15.1). Каждый из этих уровней порождает разрешённую энергетическую зону. Состояния в каждой из этих зон не локализованы вблизи одной из ям, а распределены между ямами.

*Для верхней из зон с  $E < 0$*  «родительские» состояния отдельных электронов отвечают наибольшему значению квантового числа  $n$ , а поле ядра экранируется остальными электронами, так что эффективный заряд ядра в оценках (В.23)  $Z = 1$ . При этом размер области локализации отдельного «родительского» иона сравним с расстоянием до «соседей». Поэтому коэффициент туннелирования не слишком мал, и верхние из разрешённых зон при  $E < 0$  — относительно широкие.

*Для более глубоких зон* «родительские» состояния уединённых электронов отвечают меньшим значениям квантового числа  $n$ , чем для верхнего уровня, а эффективный заряд ядра больше 1 (меньше электронов участвует в экранировании). Поэтому эффективные размеры ионов уменьшаются, расстояние туннелирования приближается к максимально возможному значению — расстоянию между ионами (параметру решётки)  $a$ . Для этих уровней увеличивается по величине и второй множитель под интегралом коэффициента туннелирования. В большей части классически запрещённой области, определяющей коэффициент туннелирования,  $|E_k| \gg |V|$ , поэтому (7.29) даёт  $D_k \approx \exp(-a\sqrt{2m|E_k|}/\hbar)$ . Значит, коэффициент туннелирования для  $k$ -й зоны  $D_k$  очень мал так, что набор разрешённых энергий глубоко расположенных зон практически не отличается от  $N$ -кратно тиражированного набора энергий уровней изолированных ионов.

*Численный пример.* Для Al и Si объём одного грамм-атома  $\sim 10 \text{ см}^3$ . Поэтому среднее межатомное расстояние в таком кристалле составляет  $2.5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ . Для энергии  $E_k \approx -10 \text{ эВ}$  величина  $\hbar/\sqrt{2m|E|} \approx 0,6 \cdot 10^{-8} \text{ см}$ . Для такой энергии уровня  $D_k \approx e^{-8} \approx 0,0003$ , что даёт очень малую ширину зоны  $\Delta\epsilon_k \approx 0,003 \text{ эВ}$ . При переходе к более глубокому уровню с энергией  $-100 \text{ эВ}$  ширина зоны составит ничтожно малую величину  $\Delta\epsilon_k \sim 10^{-9} \text{ эВ}$ .

В реальном кристалле периодичность решётки чуть-чуть нарушена тепловыми колебаниями (существенную роль могут играть и дислокации и примеси). Из-за этого уровни энергии электронов в соседних квазиуединённых ионах немного различаются. В соответствии с обсуж-

дением в разделе 2.6.3 и § F.3 (для пары ям), пока такое различие  $\delta E_i$  невелико, обобществление уровней в зону лишь немного отличается от того, что происходит в идеальной решётке. Когда ожидаемая ширина зоны (7.38) становится меньше  $\delta E_i$ , обобществления уровней не происходит, глубоко сидящие электроны локализируются около своих ионов.

Итак, в кристалле глубоко лежащие состояния локализируются вблизи «своих» ионов, а верхние состояния обобществляются в энергетические зоны с электронами, свободно распространяющимися по решётке.

◇ В трёхмерном случае дно энергетической зоны для электрона может лежать ниже потолка предыдущей зоны, находясь в другой области  $q$ -пространства. В этом случае говорят о перекрытии зон.

## § 7.7. Следствия нарушения периодичности

### 7.7.1. Ещё о конечных цепочках

В реальных системах число элементарных ячеек  $N$  конечно. Выше мы рассмотрели случай периодических граничных условий. Для других граничных условий решения меняются.

В важном случае **полубесконечной прямой** ( $0 > x > -\infty$ ) добавляется возможность  $0 < |\lambda_T| < 1$ , отвечающая затуханию при удалении от границы  $x = 0$ . В частности, вблизи границы кристалла разумно говорить о смещениях параллельных границе  $\ell$  и перпендикулярных ей  $tr$ . Здесь могут реализоваться решения уравнения Шредингера вида (7.1), описывающие движение вдоль поверхности с  $|\lambda_{T,\ell}| = 1$ , и одновременно убывающие по мере удаления от границы, для которых  $|\lambda_{T,tr}| < 1$  — *поверхностные уровни* — И. Е. Тамм.

*Если на полубесконечную решётку падают из свободного пространства электроны с энергией, отвечающей запрещённой зоне, они не проходят в решётку, а полностью отражаются.*

**В общем случае** мы должны рассмотреть решётку из  $N \gg 1$  одинаковых ячеек, известным (но не обязательно одним и тем же в разных случаях) образом переходящую в свободное движение при  $x < x_- < 0$  и  $x > x_+ > x_{N+1}$ . В этом случае наряду с матрицами перехода  $\hat{T}$  (7.10) можно ввести по тем же правилам матрицы перехода  $\hat{T}_\ell$  и  $\hat{T}_r$ , определяющие переходы от свободного движения вне цепочки к движению в цепочке и выход из цепочки к свободному движению. Тогда полный

переход через всю цепочку описывается произведением  $\hat{T}_{tot} = \hat{T}_\ell \hat{T}^N \hat{T}_r$ . Эта запись позволяет получить некоторые важные выводы.

∇ Для запрещённых зон периодической решётки мы имеем  $\hat{T}^N \rightarrow 0$ . Поэтому  $\hat{T}_{tot} \approx 0$ , т. е. запрещённые зоны сохраняются при любой форме границ (ср. рассуждения на стр. 173).

∇ Для уровней дискретного спектра в разрешённых зонах вычисления типа § 7.4 усложняются (добавляются коэффициенты матриц  $\hat{T}_\ell$  и  $\hat{T}_r$ ), но выводы о ширине зоны и числе уровней сохраняются.

### 7.7.2. Нарушения периодичности

Обсудим, как некоторые **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  $x = \pm b$ , 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 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 определённости слева — мы имеем вакуум). Здесь центральный участок может отсутствовать.

• *Выберем какое-нибудь значение  $E$ .* В левой области будем искать решение в виде суперпозиции двух линейно независимых решений уравнения Шредингера  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ , отвечающих двум значениям параметра периодичности  $\lambda_T$ , которые получаются из уравнения (7.12).

◇ Если энергия электрона такова, что  $|\Lambda(E)| \leq 2$ , то, как и в § 7.2, можно обозначить  $\Lambda(E) = 2 \cos qa$ , 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  $d^2E/dq^2 > 0$  движение вправо отвечает положительным значениям квазиимпульса, а влево — отрицательным.)

◇ В рассматриваемом случае нет причин для исключения решений с такими энергиями, что  $|\Lambda(E)| > 2$ , и следует рассмотреть решения

уравнения (7.12) в этом случае. Обозначив  $\Lambda(E) = \pm 2 \operatorname{ch} \kappa a$  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, поскольку 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 трёх решений, используя условия непрерывности волновой функции и её производной, как это делалось в задаче о прямоугольном барьере (2.14) или в квазиклассике (6.13).

Если периодичности справа и слева совпадают, возникающая картина сходна с той, что возникала для электрона в поле потенциальной ямы или горба.

∇ Для значения энергии, принадлежащего к разрешённой зоне, решение (суперпозиция волн с квазиимпульсом  $q > 0$  и  $< 0$ ) можно представить как волну, вышедшую, например, слева плюс отраженная (налево) волна и волну, прошедшую направо — как и в задаче о рассеянии над потенциальной ямой или горбом.

∇ Если энергия отвечает запрещённой 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 справа и слева амплитуда волновой функции убывает при отходе от границы раздела по закону  $e^{-\kappa L}$ , где  $L$  — расстояние 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 (7.12)  $|\Lambda(E)| \leq 2$ , 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 (7.12)  $|\Lambda_\ell(E)| \leq 2$ , а для правого оказалось  $|\Lambda_r(E)| > 2$ . При этом падающая на границу слева волна полностью отражается от неё, 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 (разд. 2.8) с волновой функцией, в основном сосредоточенной вблизи границы раздела и имеющей небольшую по амплитуде волновую компоненту, уходящую налево. (Разумеется, то же самое может происходить и при переходе справа налево.)

∇ И для левого и для правого участков в (7.12)  $|\Lambda(E)| > 2$ , т. е. и справа и слева волновых решений нет. В этом случае, как и выше, могут появиться уровни, локализованные вблизи границы раздела.

◇ Так, 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 запрещённым зонам в кристалле, электронные волны могут распространяться в вакууме, но не проходят глубоко в кристалл, отражаясь от границы.

∇ При энергиях  $E < 0$ , отвечающих разрешённым зонам в кристалле, электронные волны могут распространяться в кристалле, но не выходят из него, отражаясь от границы.

Сходным образом можно изучать и неоднократные нарушения периодичности.

## § 7.8. 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 расчётах 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. Мы предъядвим сначала классическое решение, и от него перейдём к квантовой картине. В отличие от курса механики [25], где эти задачи изучались с помощью уравнений Ньютона–Лагранжа, мы используем метод диагонализации гамильтониана, более удобный для квантования.

### 7.8.1. Цепочка одноатомных молекул

Простейшей моделью кристалла служит цепочка ионов с массой  $m$ , связанных пружинками одинаковой жесткости  $k = m\omega_0^2$ , рис. 5. 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 половинки ионов, связанных с ней. Результат не зависит от выбора (только его нельзя менять в процессе рассмотрения задачи!).

#### • Классическое рассмотрение.

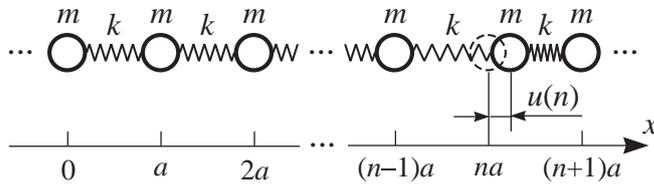


Рис. 5. Линейная цепочка

Запишем полную энергию системы (*функция Гамильтона* — гамильтониан) в виде

$$H = \sum \left[ \frac{p_n p_n^*}{2m} + \frac{m\omega_0^2(u_n - u_{n+1})(u_n^* - u_{n+1}^*)}{2} \right]. \quad (7.42)$$

Конечно, импульсы и смещения действительны, т. е.  $p_n^* = p_n$ ,  $u_k^* = u_k$ , но комплексная запись удобнее для дальнейших преобразований.

Этот гамильтониан всё ещё неудобен для исследования, так как здесь перепутаны смещения всех ионов. Чтобы улучшить дело, разложим координаты и импульсы ионов по собственным функциям оператора конечного сдвига для решётки из  $N$  ионов с периодическими граничными условиями. В нашем случае такое разложение есть просто преобразование Фурье (с учётом того, что квазиимпульс принимает значения  $q = 2\pi r/(Na)$  (7.3b)) (ниже обратите внимание на разные знаки показателей экспонент для координаты и импульса):

$$\begin{aligned} U(q) &= \frac{\sum_n u_n e^{iqx_n}}{\sqrt{N}}, & u_n &= \frac{\sum_q U(q) e^{-iqx_n}}{\sqrt{N}}; \\ P(q) &= \frac{\sum_n p_n e^{-iqx_n}}{\sqrt{N}}, & p_n &= \frac{\sum_q P(q) e^{iqx_n}}{\sqrt{N}}. \end{aligned} \quad (7.43)$$

Определённые здесь величины  $U(q)$ ,  $P(q)$  комплексны и

$$\begin{aligned} U^*(q) &= U(-q), & P^*(q) &= P(-q); \\ u_n - u_{n+1} &= \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q U(q) e^{-iqx_n} (1 - e^{-iqa}). \end{aligned} \quad (7.44)$$

Подставим эти выражения в функцию Гамильтона (7.42). С учётом условий ортонормированности для преобразований Фурье в этом представлении функция Гамильтона диагонализуется:

$$H = \sum_q \mathcal{H}(q), \quad \mathcal{H}(q) = \frac{P(q)P^*(q)}{2m} + \frac{2m\omega_0^2(1 - \cos qa)U(q)U^*(q)}{2}. \quad (7.45)$$

Гамильтониан колеблющейся решётки превратился в сумму гамильтонианов невзаимодействующих осцилляторов  $\mathcal{H}(q)$ , т. е. задача свелась

к описанию системы независимых осцилляторов — *нормальных колебаний* с частотами

$$\omega \equiv \omega(q) = 2\omega_0 |\sin(qa/2)|. \quad (7.46a)$$

Здесь имеется вырождение по знаку  $q$  — в соответствии с теоремой Крамерса. Видно, что при небольших  $q$  с хорошей точностью

$$\omega(q) = Cq; \quad C = \omega_0 a. \quad (7.46b)$$

Это соответствует звуковым волнам со скоростью звука  $C$ .

Собственные векторы, отвечающие разным квазиимпульсам, — *нормальные колебания* — бегущие волны (7.43).

• **Квантовое описание.** Преобразование Фурье (7.43) не перемещивает координаты и импульсы. Поэтому представление (7.45) получается и в квантовом случае. Кроме того, для компонент Фурье  $U(q)$  и  $P(q)$  имеют место те же перестановочные соотношения (1.26), что и для отдельных координат и импульсов частиц:

$$[P(q), U(q')] = -i\hbar\delta_{qq'}. \quad (7.47)$$

В итоге для описания состояний каждого из получившихся осцилляторов применимо всё 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:

$$\hat{a}(q) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{U}(q)}{U_{q0}} + i \frac{\hat{P}(q)}{P_{q0}} \right); \quad \hat{a}^+(q) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{U}^+(q)}{U_{q0}} - i \frac{\hat{P}(q)}{P_{q0}} \right). \quad (7.48)$$

Операторы  $\hat{U}(q)$  и  $\hat{P}(q)$  легко выражаются через  $\hat{a}(q)$  и  $\hat{a}^+(q)$ . Подстановка этих выражений преобразует гамильтониан (7.45) к виду

$$\hat{H} = \sum_q \hbar\omega(q) \left( \hat{a}^+(q)\hat{a}(q) + \frac{1}{2} \right). \quad (7.49)$$

Для каждого нормального колебания с частотой  $\omega(q)$  (7.46a) возможные энергии стационарных состояний имеют хорошо известный вид  $E(q) = \hbar\omega(q)(n_q + 1/2)$  с целыми  $n_q$ . Волновые функции вида (4.25) определены в координатах  $U(q)$ , связь которых со смещениями задаётся преобразованием (7.43). Подчеркнём, что ни один из получившихся

осцилляторов не представляет собой движения какого-нибудь одного иона, каждый включает движение всех ионов.

Отдельные возбуждения независимых осцилляторов («виброны» гл. 4) в этом случае называются *фононами*. Это — кванты волн, распространяющихся по решётке, их закон дисперсии имеет вид (7.46а). Операторы  $\hat{a}(q)$  и  $\hat{a}^+(q)$  — 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, § 14.1).

### 7.8.2. Цепочка двухатомных молекул

Рассмотрим цепочку двухатомных «молекул» с параметром решётки  $2a$ , 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 между стенками.** Обсудим сначала простейшую модель: два одинаковых иона, связанных пружинкой  $k_1$  и соединённых 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»

$$\hat{H} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{m\omega_1^2(u_1 - u_2)^2}{2} + \frac{m\omega_2^2(u_1^2 + u_2^2)}{2}. \quad (7.50a)$$

Перейдём к комбинированным смещениям  $u_{\pm} = (u_1 \pm u_2)/\sqrt{2}$  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:

$$u_{\pm} = \frac{u_1 \pm u_2}{\sqrt{2}} \Rightarrow \hat{H} = \hat{H}_+ + \hat{H}_-, \quad (7.50b)$$

$$\hat{H}_{\pm} = \frac{p_{\pm}^2}{2m} + \frac{m\omega_{\pm}^2 u_{\pm}^2}{2}, \quad \omega_-^2 = 2\omega_1^2 + \omega_2^2, \quad \omega_+ = \omega_2.$$

Нетрудно проверить, что использованные преобразования сохраняют для новых смещений и импульсов те же перестановочные соотношения (1.26), что и для исходных, ср. (7.47). Поэтому для описания состояний каждого из осцилляторов достаточно повторить сказанное в гл. 4. Видоизменения в случае неравных масс просты — см. примечание на стр. 114.

Итак, частота колебаний «молекулы» как целого  $\omega_+$  определяется только жесткостью «внешних» связей «молекулы», она относительно невелика. Частота «колебаний ионов в молекуле»  $\omega_-$  относительно велика. (У свободной молекулы это были бы обычные колебания с частотой  $\omega_1\sqrt{2}$ .)

• **Гамильтониан цепочки двухатомных молекул** мы запишем в виде, сходном с (7.42):

$$H = \sum_n \left[ \frac{p_{2n}^* p_{2n}}{2m} + \frac{p_{2n+1}^* p_{2n+1}}{2m} + \frac{k_1 \Delta_{2n}^* \Delta_{2n}}{2} + \frac{k_2 \Delta_{2n-1}^* \Delta_{2n-1}}{2} \right], \quad (7.51)$$

$$\text{где } \Delta_B = u_{B+1} - u_B.$$

Условимся говорить, что «пружинки»  $(2n) - (2n+1)$  отвечают связям внутри «молекулы», а «пружинки»  $(2n) - (2n-1)$  — межмолекулярным связям. За элементарную ячейку можно принять любой отрезок длины  $2a$ , например, от чётного иона до следующего чётного иона, или от нечётного до нечётного и т. п., т. е. мы обозначаем  $x_n = 2na$ .

Разложение по собственным функциям оператора конечного сдвига (разложение Фурье) вида (7.43) выполняется отдельно для смещений чётных (*ev*) и нечётных (*od*) частиц (обратные преобразования также выписываются по образцу (7.43)):

$$u_{2n} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q U_{ev}(q) e^{-iqx_n}, \quad u_{2n+1} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q U_{od}(q) e^{-iq(x_n+a)},$$

$$p_{2n} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q P_{ev}(q) e^{iqx_n}, \quad p_{2n+1} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q P_{od}(q) e^{iq(x_n+a)}.$$

(Дополнительный сдвиг аргумента у координат нечётной частицы учитывает реальное расстояние между соседями.)

Подстановка этих выражений в гамильтониан преобразует его, подобно (7.45), в сумму гамильтонианов  $\mathcal{H}(q)$  систем с двумя степенями

свободы каждый, отвечающих отдельным значениям квазиимпульса  $q$ , пробегающего значения (7.3b). Каждый из этих гамильтонианов напоминает гамильтониан уединённой молекулы (7.50):

$$H = \sum_q \mathcal{H}_2(q), \quad (7.52)$$

где

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_2(q) &= \frac{P_{ev}(q)P_{ev}^*(q)}{2m} + \frac{P_{od}(q)P_{od}^*(q)}{2m} + \\ &+ m \frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2} [U_{ev}(q)U_{ev}^*(q) + U_{od}(q)U_{od}^*(q)] - \\ &- \frac{m}{2} [U_{ev}(q)U_{od}^*(q) (\omega_1^2 e^{iqa} + \omega_2^2 e^{-iqa}) + U_{ev}^*(q)U_{od}(q) (\omega_1^2 e^{-iqa} + \omega_2^2 e^{iqa})]. \end{aligned}$$

Далее гамильтониан  $\mathcal{H}_2(q)$  преобразуется к диагональной форме<sup>1</sup>:

$$\mathcal{H}_2(q) = \mathcal{H}_+(q) + \mathcal{H}_-(q), \quad \mathcal{H}_\pm(q) = \frac{P_\pm^2}{2m} + \frac{m\omega_\pm^2(q)U_\pm^2(q)}{2}, \quad (7.53a)$$

с помощью преобразований

$$\begin{aligned} U_\pm(q) &= \frac{U_{ev}(q)e^{i\phi} \pm U_{od}(q)e^{-i\phi}}{\sqrt{2}}, \\ P_\pm(q) &= \frac{P_{ev}(q)e^{-i\phi} \pm P_{od}(q)e^{i\phi}}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (7.53b)$$

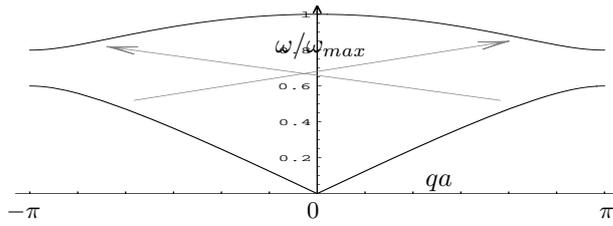
Нетрудно проверить, что эти преобразования сохраняют для новых смещений  $U(q)$  и импульсов  $P(q)$  те же перестановочные соотношения (1.26), что и для исходных.

Угол  $\phi$  и частоты нормальных осцилляторов определяются стандартным образом (диагонализация квадратичной формы потенциальной энергии):

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} 2\phi &= \frac{\omega_1^2 - \omega_2^2}{\omega_1^2 + \omega_2^2} \operatorname{tg}(qa), \\ \omega_\pm^2 &= \frac{\omega_1^2 + \omega_2^2 \pm \sqrt{(\omega_1^2 + \omega_2^2)^2 - 4\omega_1^2\omega_2^2 \sin^2(qa)}}{2}. \end{aligned} \quad (7.53c)$$

Этот спектр показан на рис. 6.

<sup>1</sup>Гамильтониан  $\mathcal{H}_2(q)$  выглядит неэрмитовым — он содержит мнимую часть. Однако, для этого гамильтониана эрмитово сопряжение включает не только замену  $i \rightarrow -i$ , но и замену  $U_{ev} \leftrightarrow U_{od}$ . При этой замене гамильтониан  $\mathcal{H}_2(q)$  не меняется.

Рис. 6. Две ветви колебаний при  $\omega_2 = 3\omega_1/4$ 

◇ При небольших  $q$  получается

$$\omega_-^2 \approx \frac{2\omega_1^2\omega_2^2}{\omega_1^2 + \omega_2^2} \sin^2(qa), \quad \omega_+^2 \approx 2(\omega_1^2 + \omega_2^2). \quad (7.54)$$

В соответствии с (7.53b) в колебаниях с частотами  $\omega_-$  соседние ионы смещаются в одну сторону, среда колеблется как целое. Эти колебания называют *акустическими*<sup>1</sup>, 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.

Колебания  $\omega_+$  — высокочастотные, в этих колебаниях соседние ионы колеблются в противоположные стороны (противофазно). Такие колебания могут возбуждаться электромагнитной волной с длиной волны  $\sim a$  — светом. Поэтому их называют *оптическими* (оптическая ветвь колебаний). С ростом квазиимпульса частота этих колебаний медленно убывает.

◇ Если  $\omega_1 \gg \omega_2$ , закон дисперсии (7.54) для акустических колебаний  $\omega_-$  переходит в закон (7.46a) 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 (7.54) для оптических колебаний  $\omega_+$  переходит в соотношение  $\omega_+ = \omega_1\sqrt{2}$  для отдельных молекул. Это частный случай общего утверждения, что *спектр оптических колебаний*

<sup>1</sup>Существование акустической ветви колебаний — чрезвычайно общий факт. Н. Н. Боголюбов доказал это, предполагая только, что энергия парного взаимодействия частиц, образовавших вещество, быстро убывает 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.

воспроизводит спектр собственных колебаний уединённой молекулы с «размазкой», которая определяется жесткостью связей.

◇ При изменении  $k_2/k_1$  качественные черты картины меняются слабо, а вот при  $k_2 = k_1$  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 получаются 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.)

• **Квантовое рассмотрение** повторяет всё, что было сказано для цепочки одноатомных молекул. Отличие состоит только в том, что теперь в системе появляются две ветви спектра колебаний рис. 6 и, соответственно, два типа операторов рождения и уничтожения, отвечающих акустической и оптической ветвям колебаний (два типа фононов).

• **Переход к бесконечной цепочке** описывается заменой сумм (7.45), (7.52) на интегралы  $\frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq \mathcal{H}(q)$ . Получающийся оператор  $\mathcal{H}(q)$  называют плотностью гамильтониана в импульсном пространстве (но нередко и просто гамильтонианом).

• В трёхмерном случае эффективная масса электрона и скорость звука могут быть анизотропными. Соответственно, анизотропными окажутся проводимость, магнитная восприимчивость и другие физические свойства кристалла.

## § 7.9. Квазичастицы

В реальном кристалле электроны сильно взаимодействуют между собой. На первый взгляд, это делает бесполезным представление об одиноком электроне, путешествующем по периодической решётке. Оказалось, однако, что многие свойства кристалла 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 изучали выше.

Перечислим некоторые типы квазичастиц в твёрдом теле.

1. *Электроны и дырки* — возбуждения, обсуждавшиеся в § 7.2, см. (7.16). 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, и *положительным* зарядом.
2. *Фононы* — кванты нормальных колебаний решётки (разных бегущих волн). В трёхмерном кристалле у них появляется дополнительная степень свободы — *поляризация* (продольная и две поперечных).
3. *Магноны* — кванты спиновых волн — колебаний магнитного момента атомов.
4. *Экситоны* в диэлектриках и полупроводниках — связанные состояния дырки и электрона из вышележащей зоны (похожие на атом).

## § 7.10. Эффект Мёссбауэра

Пусть атомное ядро с массой  $M$  может находиться в возбуждённом состоянии с энергией  $\epsilon$  и переходит в основное состояние, излучая фотон с энергией  $\epsilon'$  ( $\gamma$ -радиоактивность). Мы обсудим исторически первый исследованный пример такого рода,  $A = \text{Fe}^{57}$ . В этом случае

$$\epsilon = 14 \text{КэВ} = 1,4 \cdot 10^4 \text{ эВ}, \quad Mc^2 \approx 53 \cdot 10^9 \text{ эВ},$$

$$\text{собственная ширина линии } \Gamma \approx 5 \cdot 10^{-9} \text{ эВ}.$$

Обсудим зависимость поглощения фотонов ( $\gamma$ -квантов) от их энергии в (не очень толстом) образце, содержащем ядра  $A$ . Пока энергия

фотонов заметно отличается от  $\epsilon$ , основным механизмом уменьшения их потока является рассеяние на атомах вещества (с возможной ионизацией последних). Не очень толстые образцы вещества почти прозрачны для таких  $\gamma$ -квантов. Фотоны же с энергией  $\epsilon$  должны сильно (резонансно) поглощаться в образце ядрами А, 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 А, то, на первый взгляд, фотоны, излучённые ядрами в образце I, будут сильно поглощаться в образце II из-за резонансного поглощения ядрами А этого образца. Мы увидим, что при низких температурах в простейшем случае газовых образцов учёт эффектов отдачи разрушает эту возможность и она восстанавливается в кристаллических образцах как чисто квантовый эффект.

**Свободные ядра в газе.** Рассмотрим сначала покоящееся ядро. После излучения импульс отдачи ядра равен импульсу фотона  $k = \epsilon'/c$ , а энергия перехода  $\epsilon$  есть сумма энергий фотона  $\epsilon'$  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

$$R = \epsilon^2/(2Mc^2). \quad (7.55)$$

(С той же точностью энергия  $\epsilon''$ , которую должен иметь фотон, чтобы поглотиться невозбуждённым ядром, есть  $\epsilon'' = \epsilon + R$ .) Для  $\text{Fe}^{57}$  энергия отдачи  $R \approx 2 \cdot 10^{-3} \text{эВ} \gg \Gamma$ . (Такой же сдвиг энергии фотона получается за счёт 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 —  $E_\gamma$ . Баланс энергии:

$$E_i + \epsilon = E_f + E_\gamma, \quad \text{т. е.} \quad E_\gamma = \epsilon - R + \mathbf{k}\mathbf{p}/M = \epsilon - R + \mathbf{v}\mathbf{k}.$$

Для газа это даёт распределение числа фотонов по энергиям  $E_\gamma$ , которое получается сверткой этого выражения для  $E_\gamma$  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, пик в коэффициенте поглощения должен исчезнуть. Эта классическая картина сохраняется и при квантовом рассмотрении ядер в газе.

**Для ядер в кристалле** только квантовое рассмотрение имеет смысл. Обозначим через  $|i\rangle$  вектор начального состояния ядра в кристалле (до излучения) без учёта ядерных степеней свободы. После излучения фотона с импульсом  $k$  (оно 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 (1.31). Начальное состояние  $|i\rangle$  не является состоянием с определённым 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  $\epsilon$ . При этом возможность резонансного поглощения в образце II сохраняется.

Перейдём к аккуратному описанию. В простой модели *ядро* находится в *осцилляторном потенциале* с частотой  $\omega$ :

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{M\omega^2 x^2}{2}.$$

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!):

$$P_{nn} = |\langle n|\hat{T}_{-k}|n\rangle|^2 = \left| \int dx |\psi_n(x)|^2 e^{ikx/\hbar} \right|^2 = \left| \int \rho_n(x) e^{ikx/\hbar} dx \right|^2 \equiv |F_n(k)|^2.$$

Мы ввели величину  $F_n(k)$  — фурье-образ плотности вероятности; его называют **формфактором**. Если  $\rho_n(x) = \rho_n(-x)$ , то  $F_n(k)$  действительна. При малых  $k$

$$F_n(k) = \int \rho_n(x) \cdot \left( 1 + \frac{ikx}{\hbar} - \frac{1}{2} \left( \frac{kx}{\hbar} \right)^2 + \dots \right) dx \approx 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{k}{\hbar} \right)^2 \langle x^2 \rangle.$$

Если начальное состояние — основное, то  $|f\rangle$  — когерентное состояние (§ 4.5) с  $\alpha = -i\hbar k/\sqrt{2m\hbar\omega}$ . Вероятность излучения без отдачи

даётся соотношением (4.45):

$$P_{00}(\omega) = e^{-k^2/2m\hbar\omega} \equiv e^{-R/\hbar\omega}.$$

Если частица участвует одновременно в двух колебательных движениях, с частотами  $\omega_1$  и  $\omega_2$ , 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 решётки, плотность числа которых есть  $\rho(\omega)$  (16.27b). В итоге вероятность излучения без отдачи оказывается произведением таких вероятностей для всех нормальных колебаний кристалла, имеющих одинаковую поляризацию

$$P_{00} = \exp\left(-R \int \frac{\rho(\omega)}{\hbar\omega} d\omega\right). \quad (7.56)$$

Правая часть этого соотношения называется *фактором Дебая–Валлера*. Он встречается и в других задачах физики твёрдого тела (ср. 4.35, (5.15b)). Его экспериментальное изучение — хороший способ исследования свойств решётки в целом.

### § 7.11. Задачи

1. Для движения в периодическом потенциале из  $\delta$ -ям (7.19) найти собственное состояние с определённым значением квазиимпульса  $q$  при  $E < 0$ . Вычислите плотность тока вероятности для этого состояния.
2. Получить матрицу перехода для решётки, ячейка которой — прямоугольная яма глубиной  $-V$  и шириной  $b$ , а расстояние до следующей ямы —  $(a - b)$  (7.26).
3. Найти поток энергии волнового пакета атомных смещений, распространяющегося по простой линейной цепочке.
4. Найти энергию и волновую функцию состояния, локализованного вблизи «примеси» при  $x = 0$ , моделируя её заменой  $-G\delta(x) \rightarrow -G_1\delta(x)$  в поле (7.19) при достаточно большом отличии  $G_1$  от  $G$ .  
*Ответ.*  $E = -mG_1^2/2\hbar^2$ .

*Этот ответ справедлив только при условии, что уровни в уединённых «родительских» ямах силы  $G$  и  $G_1$  отличаются значительно больше, чем на ширину зоны. Что будет, если различие меньше ширины зоны?*

5. Найти энергию поверхностного уровня для задачи на полупрямой при  $k_0 a \gg 1$  ( $0 < b < a$ ):

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < b, \\ -G \sum_{n=1}^{\infty} \delta(x - na) & \text{при } x > b. \end{cases}$$

Ответ.  $E_T = -\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} (1 - 2e^{-2k_0 b})$ .

## Глава 8

# 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). Возникающий при этом оператор момента импульса частицы задаётся, как и в классическом случае, соотношением

$$\hat{\mathbf{L}} = [\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}] \equiv \hbar \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}}. \quad (8.1)$$

Здесь определен ещё удобный безразмерный оператор  $\hat{\boldsymbol{\ell}} \equiv \hat{\mathbf{L}}/\hbar$ , его мы тоже называем оператором момента импульса.

Более аккуратно, момент импульса определяется как величина, которая сохраняется в силу инвариантности относительно вращения. Покажем, что этот оператор имеет именно вид (8.1), используя ту же схему, что и при получении оператора импульса в § 1.8. Там мы строили оператор импульса для одномерного пространства, переход к трёхмерному пространству был тривиальным, поскольку движения в разных направлениях, очевидно, не зависимы друг от друга.

При описании вращений дело обстоит не так просто. Во-первых, надо выбрать центр вращения. Во-вторых, переход к сферическим координатам требует выбора полярной оси. Описание вращений вокруг полярной оси и какой-нибудь из других осей в сферических координатах не выглядят одинаково. Поэтому удобнее использовать прямоугольные Декартовы координаты. Но в этих координатах вращение на конечный угол описывается не очень просто, сравнительно простые результаты получаются лишь при изучении «элементарных вращений» на бесконечно малые углы вокруг каждой из координатных осей.

Рассмотрим для начала вращение вокруг оси  $z$  на угол  $\varphi$ , т. е. преобразование произвольной функции координат<sup>1</sup>  $f(x, y, z)$ :

$$\hat{U}_\varphi^z f(x, y, z) = f(x \cos \varphi - y \sin \varphi, y \cos \varphi + x \sin \varphi, z).$$

---

<sup>1</sup>Это — пример реализации общего оператора преобразования  $\hat{U}^{f \rightarrow g}$  (1.23).

При бесконечно малом повороте  $\delta\varphi \ll 1$  преобразование принимает вид

$$\begin{aligned} \hat{U}_{\delta\varphi}^z f(x, y, z) &= f(x - y\delta\varphi, y + x\delta\varphi, z) = \left[ 1 - \left( y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) \delta\varphi \right] f(x, y, z) \equiv \\ &\equiv \left( 1 + i\hat{\ell}_z \delta\varphi \right) f(x, y, z), \quad i\hat{\ell}_z = -y \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial y} \equiv \frac{i}{\hbar} (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x). \end{aligned} \quad (8.2)$$

Итак, оператор  $\hat{U}_{\delta\varphi}^z \equiv \left( 1 + i\hat{\ell}_z \delta\varphi \right)$  есть оператор поворота вокруг оси  $z$  на бесконечно малый угол  $\delta\varphi$ , а оператор  $\hat{\ell}_z \equiv \hat{L}_z/\hbar$  — генератор такого поворота (ср. § 1.8).

Таким же способом и другие компоненты вектора  $\hat{\ell}$  (8.1) определяются через операторы бесконечно малых поворотов вокруг других осей — как генераторы таких поворотов. В целом операторы  $\hat{\ell}_i$  ( $\hat{L}_i$ ) исчерпывают набор генераторов (*неабелевой*) группы вращений  $O(3)$ .

Если гамильтониан системы не меняется при таких поворотах, то перечисленные операторы коммутируют с гамильтонианом, а это означает, что физические величины, описываемые этими операторами, сохраняются (см. § 2.2). Величину, сохранение которой следует из неизменности формы гамильтониана при вращениях, называют моментом импульса. Выбирая нормировки из принципа соответствия (по аналогии с § 1.8), мы получаем для момента выражения (8.1).

Теперь прямое вычисление с помощью соотношений (1.26) показывает, что компоненты момента импульса не коммутируют друг с другом, перестановочные соотношения между ними можно записать в виде

$$[\hat{\ell}_i, \hat{\ell}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{\ell}_k. \quad (8.3)$$

Некоммутативность генераторов группы пространственных вращений иллюстрируется простым классическим примером. Рассмотрим два разных движения из некоторой точки  $A$  на экваторе. Сместившись на  $\ell_1 = 200$  км на восток, а затем на  $\ell_2 = 200$  км на юг, мы попадём в некоторую точку  $B$ . Сместившись же на  $\ell_2 = 200$  км на юг, а затем на  $\ell_1 = 200$  км на восток, мы попадём в другую точку  $B'$ , расположенную на расстоянии  $\ell_1\ell_2/2R \approx 3$  км к востоку от  $B$  ( $R$  — радиус Земли).

• Оператор вращення на конечный угол определяют подобно тому, как было сделано в § 1.8 для оператора конечного сдвига (1.31). Для вращення на угол  $\alpha$  относительно оси  $\mathbf{n}$  этот оператор имеет вид

$$\hat{U}_n(\alpha) = e^{i\alpha\hat{\mathbf{L}}\mathbf{n}/\hbar} \equiv e^{i\alpha\hat{\ell}\mathbf{n}}. \quad (8.4)$$

В частности, оператор вращения вокруг оси  $z$  можно записать в виде  $e^{i\alpha\partial/\partial\varphi}$  — в полной аналогии с (1.31). Как и в одномерном случае, это влечёт за собой выражение (8.25) для  $z$ -компоненты момента импульса.

Вращения вокруг осей  $x$  и  $y$  не сводятся к простым сдвигам координат  $\theta$  и  $\varphi$ . Поэтому записанные в сферических координатах выражения для операторов конечных вращений вокруг этих осей и сами проекции оператора момента импульса выглядят сложнее (см. ниже (8.25)).

• В силу цикличности угловой координаты, перестановочное соотношение компонента момента — угол и соответствующее соотношение неопределённостей следует записывать в виде:

$$[\hat{\ell}_z, \sin \phi] = -i \cos \phi \Rightarrow \Delta \ell_z \Delta \sin \phi \geq |\cos \phi|/2. \quad (8.5)$$

• Далее полезно рассмотреть преобразование произвольного векторного оператора  $\mathbf{A}$  при том же вращении вокруг оси  $z$ , записав этот оператор в координатном представлении

$$\hat{\mathbf{A}} = (\hat{A}_x, \hat{A}_y, \hat{A}_z) \rightarrow (\hat{A}_x \cos \varphi - \hat{A}_y \sin \varphi, \hat{A}_y \cos \varphi + \hat{A}_x \sin \varphi, \hat{A}_z).$$

Запишем это преобразование для бесконечно малого угла поворота  $\delta\varphi$  и сравним получившееся выражение с общим преобразованием (1.23) для выписанного выше оператора малого поворота  $\hat{U}_{\delta\varphi}^z$ :

$$(\hat{U}_{\delta\varphi}^z)^\dagger (\hat{A}_x, \hat{A}_y, \hat{A}_z) \hat{U}_{\delta\varphi}^z \equiv (1 - i\hat{\ell}_z d\delta\varphi) (\hat{A}_x, \hat{A}_y, \hat{A}_z) (1 + i\hat{\ell}_z d\delta\varphi).$$

Эти выражения, очевидно, должны совпадать, т. е. удерживая лишь члены не выше первого порядка по  $\delta\varphi$ , мы имеем

$$(\hat{A}_x, \hat{A}_y, \hat{A}_z) + \delta\varphi(-\hat{A}_y, \hat{A}_x, 0) = (\hat{A}_x, \hat{A}_y, \hat{A}_z) - i\delta\varphi [\hat{\ell}_z, (\hat{A}_x, \hat{A}_y, \hat{A}_z)].$$

Отсюда видно, что  $[\hat{\ell}_z, \hat{A}_x] = -i\hat{A}_y$ ,  $[\hat{\ell}_z, \hat{A}_y] = i\hat{A}_x$ ,  $[\hat{\ell}_z, \hat{A}_z] = 0$ . Повторяя это вычисление для других компонент, можно записать общие перестановочные соотношения компонент момента импульса с компонентами любого вектора

$$[\hat{\ell}_i, \hat{A}_j] = ie_{ijk}\hat{A}_k. \quad (8.6)$$

(В задаче (1.14) мы проверяли это для случаев, когда  $\mathbf{A} = \mathbf{r}$ ,  $\mathbf{p}$  или  $\mathbf{L}$ .)

• Подобное вычисление даёт коммутаторы компонент момента со скалярным оператором  $\hat{S}$ , с компонентами произвольного тензора второго ранга  $T_{ab}$  и т. д.:

$$[\hat{\ell}_i, \hat{S}] = 0, \quad [\hat{\ell}_i, T_{ab}] = ie_{iar}\hat{T}_{rb} + ie_{ibr}\hat{T}_{ar}. \quad (8.7)$$

Перестановочные соотношения (8.3) — (8.7) выражают свойство группы вращений, вне зависимости от существования реализации (8.1), (8.2). В частности, они выполняются для операторов суммарного момента системы частиц (это легко проверяется прямой подстановкой), для спина (см. ниже) и т. п.

### § 8.1. Следствия алгебры коммутаторов

Многие свойства момента импульса определяются только его перестановочными соотношениями (8.3).

• Соотношения (8.3) показывают, что различные компоненты момента импульса не могут быть фиксированы одновременно (не измеримы одновременно); имеют место соотношения неопределённостей вида

$$\Delta \ell_x \cdot \Delta \ell_y \geq |\langle \ell_z \rangle|/2. \quad (8.8)$$

Это означает, что не существует такого состояния квантовой системы, в котором все компоненты момента одновременно имели бы определённые ненулевые значения.

• В то же время из (8.3) нетрудно получить, что

$$[\hat{\ell}^2, \hat{\ell}_j] = 0 \quad \left( \hat{\ell}^2 = \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + \hat{\ell}_z^2 \right), \quad (8.9)$$

т. е. квадрат момента импульса и его проекция на одну из осей (например,  $\hat{\ell}_z$ ) одновременно измеримы<sup>1</sup>. Поэтому мы будем искать совместные собственные векторы операторов  $\hat{\ell}^2$  и  $\hat{\ell}_z$ , чьи собственные значения мы обозначим  $\Lambda$  (временно) и  $m$ :

$$\hat{\ell}^2|\psi_\ell\rangle = \Lambda|\psi_\ell\rangle, \quad \hat{\ell}_z|\psi_\ell\rangle = m|\psi_\ell\rangle. \quad (8.10a)$$

<sup>1</sup>Можно показать, что из компонент оператора момента импульса нельзя построить ещё один нетривиальный оператор, коммутирующий с  $\hat{\ell}^2$  и  $\hat{\ell}_z$ , но не выражающийся через них. (Это — свойство группы трёхмерных вращений.)

Эти собственные векторы мы будем нумеровать двумя метками  $\lambda$  (временно), отвечающей собственному значению  $\hat{\ell}^2$  и  $m$ , отвечающей собственному значению  $\hat{\ell}_z$ ,

$$|\psi_\ell\rangle \equiv |\lambda, m\rangle. \quad (8.10b)$$

Отметим, 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.

◇ Перейдём теперь к построению указанных собственных векторов. Для этого определим ещё

$$\hat{\ell}_\pm = \hat{\ell}_x \pm i\hat{\ell}_y. \quad (8.11)$$

Тогда из соотношений (8.3) получается

$$[\hat{\ell}_+, \hat{\ell}_-] = 2\hat{\ell}_z; \quad [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_\pm] = \pm\hat{\ell}_\pm; \quad (8.12)$$

$$\hat{\ell}^2 = \hat{\ell}_+\hat{\ell}_- + \hat{\ell}_z^2 - \hat{\ell}_z = \hat{\ell}_-\hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_z^2 + \hat{\ell}_z. \quad (8.13)$$

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  $\Lambda$ .

◇ 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  $\Lambda$ . С другой стороны, из соотношения  $[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_\pm] = \pm\hat{\ell}_\pm$  следует:

$$\hat{\ell}_z\hat{\ell}_\pm|\lambda, m\rangle = \hat{\ell}_\pm\hat{\ell}_z|\lambda, m\rangle \pm \hat{\ell}_\pm|\lambda, m\rangle = (m \pm 1)\hat{\ell}_\pm|\lambda, m\rangle.$$

Это означает, что  $\hat{\ell}_\pm|\lambda, m\rangle$  — собственные векторы оператора  $\hat{\ell}_z$  с собственными значениями  $m \pm 1$  (ниже  $c_{\lambda m}^\pm$  — неизвестная пока константа):

$$\hat{\ell}_\pm|\lambda, m\rangle = c_{\lambda m}^\pm|\lambda, m \pm 1\rangle. \quad (8.14)$$

Иными словами операторы  $\hat{\ell}_+$  и  $\hat{\ell}_-$  повышают и понижают проекцию момента на ось  $z$  соответственно.

◇ Поскольку операторы  $\hat{\ell}_i$  эрмитовы, то средние значения операторов  $\hat{\ell}_x^2$  и  $\hat{\ell}_y^2$  не отрицательны (ср. задачу 1.13). Следовательно, среднее  $\langle |\hat{\ell}_z^2| \rangle$  по любому состоянию не превышает  $\Lambda = \langle |\hat{\ell}^2| \rangle$ . Поэтому при заданном  $\Lambda$  существует наибольшее значение  $m$ , обозначим его  $\ell$ . Как и в случае с действием оператора уничтожения на основное состояние осциллятора, из определения  $\ell$  следует, что  $\hat{\ell}_+|\lambda, \ell\rangle = 0$ . С учётом этого из (8.13) получается  $(\hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2)|\lambda, \ell\rangle = \hat{\ell}_- \hat{\ell}_+|\lambda, \ell\rangle = 0$ , т. е.

$$\hat{\ell}^2|\lambda, \ell\rangle = (\ell^2 + \ell)|\lambda, \ell\rangle$$

Сравнивая с определением (8.10a), мы получаем  $\Lambda = \ell(\ell + 1)$ .

Далее мы перейдём к обычно используемым обозначениям, заменив метку  $\lambda$  на  $\ell$ , т. е. будем писать  $|\ell, m\rangle$  взамен  $|\lambda, m\rangle$  так, что определения (8.10a) принимают вид:

$$\hat{\ell}^2|\ell, m\rangle = \ell(\ell + 1)|\ell, m\rangle; \quad \hat{\ell}_z|\ell, m\rangle = m|\ell, m\rangle. \quad (8.15)$$

В силу (8.14),  $(\hat{\ell}_-)^k|\ell, \ell\rangle \propto |\ell, \ell - k\rangle$ . Увеличивая  $k$ , мы придём к наименьшему собственному значению  $\hat{\ell}_z$ , равному  $-\ell$ . Поэтому

$$\boxed{2\ell - \text{целое число.}} \quad (8.16)$$

Полное же число состояний с различными  $\ell_z$  при фиксированном значении  $\ell$  есть, очевидно,  $2\ell + 1$ .

Из (8.15) видно, что даже в состоянии с наибольшим значением проекции момента на ось  $z$ , при  $m = \ell$ , квадрат длины вектора момента больше  $\ell_z^2$ , т. е.  $\langle \ell_x^2 \rangle, \langle \ell_y^2 \rangle \neq 0$ . В состоянии  $|\ell, m\rangle$  средние значения проекций момента на оси  $x$  и  $y$  — нули, т. е., например,  $\langle \ell_x \rangle = 0$ . 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  $\langle \ell_x^2 \rangle_{\ell, \ell} = \ell/2$ , и произведение  $\Delta \ell_x \Delta \ell_y$  тоже равно  $\ell/2$ . Это нетрудно понять с помощью соотношения неопределённостей (8.8). Иными словами, в состоянии  $|\ell, \ell\rangle$  реализуется минимально допустимый соотношением неопределённостей разброс проекций момента на оси  $x$  и  $y$ .

На языке теории представлений групп говорят, что векторы состояний  $|\ell, m\rangle$  реализуют базис  $2\ell + 1$ -мерного представления группы вращений.

• **Чётность собственных состояний момента.**

При отражении координат компоненты радиуса-вектора и импульса

меняют знак. Такие векторы называют *полярными* (или просто векторами). Полярным вектором является, например, и вектор электрического поля  $E$ .

В то же время, согласно определению (8.1), компоненты вектора момента импульса при отражении не меняют знак:

$$[\mathcal{P}, L_i] = 0. \quad (8.17)$$

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 определённую чётность; состояния  $|\ell, m\rangle$ , различающиеся лишь проекцией  $m$  момента на ось  $z$ , имеют одинаковую чётность.**

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 трёхмерном галилеевом мире) могут входить в качестве слагаемых скалярные произведения двух полярных векторов, например  $(\mathbf{rA})$ , или двух аксиальных векторов, например  $(\mathbf{LB})$ , но не может входить скалярное произведение полярного и аксиального векторов (это *псевдоскаляр*, он меняет знак при отражении).

• **Матричные элементы  $\ell_{\pm}$ ,  $\ell_x$ ,  $\ell_y$ .** Усреднение (8.13) по состояниям  $|\ell, m\rangle$  с учётом соотношения (8.14) даёт 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 ещё потребовать, чтобы матричные элементы были положительными числами, то отсюда получается

$$\begin{aligned} \langle \ell, m + 1 | \hat{\ell}_+ | \ell, m \rangle &= \sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} \Rightarrow \\ &\Rightarrow \hat{\ell}_+ | \ell, m \rangle = \sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} | \ell, m + 1 \rangle \end{aligned} \quad (8.18a)$$

и эрмитово сопряжённое равенство (со сдвигом  $m$  на 1)

$$\langle \ell, m - 1 | \hat{\ell}_- | \ell, m \rangle = \sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)}. \quad (8.18b)$$

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  $\hat{\ell}_x = (\hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_-)/2$ ,  $\hat{\ell}_y = (\hat{\ell}_+ - \hat{\ell}_-)/(2i)$ .

• **Некоторые проекционные операторы.** Рассмотрим действие на состоянии с заданным полным моментом  $\ell$  оператора  $\hat{P}_{\ell_z=m} = \prod_{m' \neq m} \frac{\hat{\ell}_z - m}{m' - m}$  (произведение берётся по всем возможным значениям  $m'$  проекции момента на ось  $z$ , кроме  $m$ ). Действие этого оператора на любую волновую функцию, вырезает из неё только компоненты, для которых  $\ell_z = m$ . Кроме того, нетрудно понять, что  $\hat{P}_{\ell_z=m}^2 = \hat{P}_{\ell_z=m}$ , т. е. это — проекционный оператор. Переход к проектированию на любую другую ось отвечает замене  $\hat{\ell}_z \rightarrow (\hat{\ell}\mathbf{n})$ , где  $\mathbf{n}$  — единичный вектор, направленный вдоль этой оси. В итоге оператор, вырезающий из волновой функции состояния с проекцией момента на ось  $\mathbf{n}$ , равной  $m$ , и вероятность  $w$  найти частицу с этой проекцией, равны

$$\hat{P}_{(\ell_n=m)} = \prod_{m' \neq m} \frac{(\hat{\ell}\mathbf{n}) - m}{m' - m}, \quad w = \left| \hat{P}_{(\ell_n=m)} |\psi\rangle \right|^2 \equiv \langle \psi | \hat{P}_{(\ell_n=m)} |\psi\rangle. \quad (8.19)$$

Полезно записать также почти очевидное соотношение

$$\prod_m [(\hat{\ell}\mathbf{n}) - m] = 0, \quad (8.20)$$

где произведение берётся по всем возможным значениям проекции момента на любую ось  $m$  (мы просто добавили в наш проекционный оператор множитель, «убивающий» проекцию  $m$ ).

В частности, раскрывая произведение (8.20) для значений  $\ell = 1$  или 2, имеем

$$(\hat{\ell}\mathbf{n})^3 = (\hat{\ell}\mathbf{n}) \quad \text{для } \ell = 1; \quad (8.21a)$$

$$(\hat{\ell}\mathbf{n})^5 = 5(\hat{\ell}\mathbf{n})^3 - 4(\hat{\ell}\mathbf{n}) \quad \text{для } \ell = 2. \quad (8.21b)$$

Эти соотношения удобно использовать для описания вращения на конечный угол вокруг какой-нибудь оси  $\mathbf{n}$ . В частности, для  $\ell = 1$  с учётом (8.21a) оператор конечного вращения (8.4) принимает вид

$$\hat{U}_n(\alpha) = 1 - \hat{\ell}_n^2 (1 - \cos \alpha) + i \hat{\ell}_n \sin \alpha \quad \text{при } \ell = 1. \quad (8.22)$$

Подобным образом для  $\ell = 2$  соотношение (8.21b) позволяет развернуть оператор конечного вращения в полином четвёртой степени по  $\hat{\ell}_n$ . Вообще, для момента  $\ell$  оператор конечного вращения раскрывается в полином степени  $2\ell$  по оператору  $\hat{\ell}_n$ .

### § 8.2. Состояния с моментом $\ell = 1$

Рассмотрим для примера состояния с моментом импульса  $\ell = 1$  в  $\ell_z$ -представлении. Будем изображать базисные состояния этого представления в виде столбцов, опуская в обозначении волнового вектора метку  $\ell = 1$

$$|m=1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |m=0\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |m=-1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (8.23)$$

Произвольное состояние — суперпозиция этих базисных. Сопряжённые векторы состояний изображаются соответствующими строками.

Рассматривая соотношения (8.10), (8.18) как выражения для элементов матриц операторов  $\hat{\ell}_i$  в базисе (8.23), запишем теперь выражения для этих операторов в матричной форме (наподобие представлений операторов координат и импульса для осциллятора (4.14)):

$$\hat{\ell}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\ell}_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\ell}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (8.24)$$

Этот набор матриц можно рассматривать как базис трёхмерного представления группы вращений в пространстве матриц. По такому же образцу можно построить и матричные представления для более высоких значений момента.

### § 8.3. Следствия координатной записи

При описании состояний отдельной частицы полезно иметь запись собственных состояний момента импульса в сферических координатах частицы  $r, \theta, \varphi$ . Переход к этим координатам от прямоугольных

$x = r \sin \theta \cos \varphi$ ,  $y = r \sin \theta \sin \varphi$ ,  $z = r \cos \theta$  совершается по стандартным правилам дифференцирования. В частности, например, обозначая  $\rho^2 = x^2 + y^2$  и выражая сферические координаты через  $x, y, z$ , имеем

$$\frac{\hat{p}_y}{-i\hbar} \equiv \frac{\partial}{\partial y} = \frac{y}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{yz}{r^2 \rho} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{x}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \varphi}.$$

После простых, хотя и громоздких, преобразований получается

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_z &= -i \frac{\partial}{\partial \varphi}; \quad \hat{\ell}_{\pm} = e^{\pm i\varphi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right); \\ \hat{\ell}^2 &= - \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \end{aligned} \quad (8.25)$$

Обозначим  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ , при этом

$$\begin{aligned} n_z &= \cos \theta, \quad n_x = \sin \theta \cos \varphi, \quad n_y = \sin \theta \sin \varphi, \\ n_{\pm} &= n_x \pm i n_y \equiv \sin \theta e^{\pm i\varphi}. \end{aligned} \quad (8.26a)$$

Эти компоненты образуют базис векторного представления группы вращений трёхмерного 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 (ср. с (8.12)),

$$\begin{aligned} \hat{\ell}^2 n_{z,\pm} &= 2n_{z,\pm}, \quad \hat{\ell}_z n_{\pm} = \pm n_{\pm}, \quad \hat{\ell}_z n_z = 0; \\ \hat{\ell}_+ n_+ &= 0, \quad \hat{\ell}_+ n_z = n_+, \quad \hat{\ell}_+ n_- = 2n_z, \\ \hat{\ell}_- n_+ &= -2n_z, \quad \hat{\ell}_- n_z = -n_-, \quad \hat{\ell}_- n_- = 0. \end{aligned} \quad (8.26b)$$

• Найдем теперь нормированные собственные функции оператора момента импульса  $\langle \theta, \varphi | \ell, m \rangle \equiv Y_{\ell, m}(\theta, \varphi)$  для любых  $\ell$ , их называют сферическими гармониками (сферическими функциями). (Они реализуют базис  $2\ell + 1$ -мерного представления группы вращений.)

◇ Собственные функции оператора  $\hat{\ell}_z$ ,  $\varphi_m(\varphi)$  — это решения уравнения  $\hat{\ell}_z \varphi_m \equiv -i \partial \varphi_m / \partial \varphi = m \varphi_m$ . Они имеют вид:  $\varphi_m(\varphi) = (2\pi)^{-1/2} e^{im\varphi}$ . Требование однозначности этих функций при вращении на угол  $2\pi$  можно записать в виде  $\varphi_m(\varphi + 2\pi) = \varphi_m(\varphi)$ . Отсюда следует, что реализуются только целочисленные собственные значения  $m$  (сравните с (8.16)):

$$\varphi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \Rightarrow \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (8.27)$$

◇ В итоге сферические гармоники можно представить в факторизованном виде  $Y_{\ell,m} = P_{\ell,m}(\theta) \cdot \varphi_m(\varphi)$ . Чтобы найти зависимость от полярного угла  $\theta$  (функции  $P_{\ell,m}(\theta)$ ), начнём с наибольшего значения проекции момента  $m = \ell$ . Используем уравнение  $\hat{\ell}_+ \psi_{\ell\ell} = 0$ :

$$e^{i\varphi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cdot \text{ctg } \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) e^{i\ell\varphi} P_{\ell,\ell}(\theta) = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial \theta} P_{\ell,\ell} = \ell \cdot \text{ctg } \theta P_{\ell,\ell} \Rightarrow P_{\ell,\ell} \propto \sin^\ell \theta.$$

Так же получается и  $P_{\ell,-\ell} \propto \sin^\ell \theta$ . В стандартной нормировке

$$Y_{\ell,\pm\ell} = (\mp i)^\ell \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}} \cdot \frac{n_\pm^\ell}{2^\ell \ell!}. \quad (8.28a)$$

Остальные функции получаются из  $Y_{\ell,\ell}$  действием оператора  $(\hat{\ell}_-)^k$ :

$$Y_{\ell,\ell-k} \propto (\hat{\ell}_-)^k Y_{\ell,\ell}, \quad Y_{\ell,-\ell+k} \propto (\hat{\ell}_+)^k Y_{\ell,-\ell}. \quad (8.28b)$$

Соотношения (8.26b) вместе с (8.18) позволяют выразить эти функции через компоненты единичного вектора  $n_i$ . Так,

$$Y_{\ell,\pm(\ell-1)} = (\mp i)^{\ell-2} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{8\pi\ell}} \cdot \frac{n_\pm^{\ell-1} n_z}{2^{\ell-1} (\ell-1)!}. \quad (8.28c)$$

(Фазовый множитель в последней формуле выбран из дополнительных соображений удобства.)

Функции  $Y_{\ell,m}$  записывают через присоединённые функции Лежандра  $P_{\ell,m}(\cos \theta)$ :

$$Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) = i^{\ell+m+|m|} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell+|m|)!}{(\ell-|m|)!}} \cdot P_{\ell,m}(\cos \theta) e^{im\varphi}. \quad (8.29)$$

Полезно заметить, что

$$Y_{\ell,-m} = (-1)^{\ell-m} Y_{\ell,m}^*, \quad \sum_m |Y_{\ell,m}(\theta, \phi)|^2 = \frac{2\ell+1}{4\pi}. \quad (8.30)$$

Первое из этих соотношений немедленно следует из (8.29), доказательство второго соотношения можно найти в учебниках по математической физике.

Приведём для справок явные выражения сферических функций с небольшими  $\ell$  и  $m \geq 0$  (для  $m < 0$  можно воспользоваться первым равенством (8.30))

$$\begin{aligned}
 Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}; \\
 Y_{10} &= i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}n_z \equiv i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta \quad Y_{11} = i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}n_+ \equiv i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{i\phi}; \\
 Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(n_-n_+ - 2n_z^2) \equiv \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(1 - 3\cos^2\theta), \\
 Y_{21} &= \sqrt{\frac{15}{8\pi}}n_+n_z \equiv \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{i\phi}, \\
 Y_{22} &= -\sqrt{\frac{15}{32\pi}}n_+^2 \equiv -\sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{2i\phi}.
 \end{aligned} \tag{8.31}$$

Выражения для последующих сферических функций можно найти в таблицах.

• **Отражение** координат  $\mathbf{r} = -\mathbf{r}$  означает

$$r \rightarrow r, \quad \theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi.$$

Нетрудно проверить, что собственные функции состояний  $|\ell, \pm\ell\rangle$  (8.28a) при таком преобразовании умножаются на  $(-1)^\ell$ . А поскольку операторы  $\hat{\ell}_\pm$  перестановочны с оператором отражения координат, т. е. сохраняют чётность, то и для любых значений  $m$  имеем  $Y_{\ell,m}(-\mathbf{r}) = (-1)^\ell Y_{\ell,m}(\mathbf{r})$ . Это означает, что чётность состояния с определённым значением орбитального момента  $\ell$  есть  $(-1)^\ell$ ,

$$\hat{P}|\ell, m\rangle = (-1)^\ell |\ell, m\rangle. \tag{8.32}$$

Это соотношение, как и выражение (8.27), справедливо только в случае, когда оператор момента импульса связан с координатами соотношениями (8.25). Связь между моментом импульса и чётностью (8.32) 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 определённую чётность, но соотношение (8.32) не выполняется.

**Преобразования сферических функций при конечных вращениях.** Оператор вращения на конечный угол относительно произвольной оси  $\mathbf{n}$  имеет вид (8.4). Использование выражений (8.25) в этом операторе позволяет определить, как меняются выражения сферических функций при переходе к новым направлениям осей.

Удобный и идейно очень простой способ найти результаты этих преобразований даёт запись сферических функций через компоненты единичного вектора  $n_x, n_y, n_z$  (8.28), (8.31). Для этого достаточно выразить указанные компоненты через их «повёрнутые» значения  $n'_x, n'_y, n'_z$  и переразложить функции, записанные в этих осях по новому базису.

*Пример.* Рассмотрим начальное состояние с моментом  $\ell = 1$  и его проекцией на ось  $z$ , равной  $m$  и ось  $z'$ , получившуюся из  $z$  вращением на угол  $\alpha$  в плоскости  $xz$  с единичным вектором, направленным вдоль этой оси  $\boldsymbol{\lambda}$  так, что  $\boldsymbol{\lambda} = (\sin \alpha, 0, \cos \alpha)$  и  $n'_x = n_x \cos \alpha + n_z \sin \alpha$ ,  $n'_y = n_y$ ,  $n'_z = n_z \cos \alpha - n_x \sin \alpha$ . Найдём для каждого  $m$  среднее значение проекции момента на ось  $n$  и вероятности получить те или иные значения проекции момента на эту ось.

Чтобы ответить на первый вопрос, заметим, что оператор проекции момента на ось  $z'$  имеет вид  $(\hat{\boldsymbol{\ell}} \mathbf{n})$  и его среднее значение по состоянию  $|\ell, m\rangle$  есть

$$\langle \ell, m | (\hat{\boldsymbol{\ell}} \mathbf{n}) | \ell, m \rangle \equiv \langle \ell, m | (\hat{\ell}_x n_x + \hat{\ell}_y n_y + \hat{\ell}_z n_z) | \ell, m \rangle = m \cos \alpha$$

(средние значения операторов  $\hat{\ell}_x$  и  $\hat{\ell}_y$  равны нулю). Подобное вычисление даёт другое полезное в дальнейшем среднее

$$\langle \ell, m | (\hat{\boldsymbol{\ell}} \mathbf{n})^2 | \ell, m \rangle = \frac{\ell(\ell+1) - m^2}{2} \sin^2 \alpha + m^2 \cos^2 \alpha$$

Чтобы ответить на второй вопрос, заметим, что собственные функции проекций момента на повёрнутые оси имеют вид (8.31)

$$\begin{aligned} \mp i \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y'_{1,\pm 1} &= n'_\pm = n_x \cos \alpha - n_z \sin \alpha \pm i n_y, \\ -i \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y'_{10} &= n'_z = n_z \cos \alpha + n_x \sin \alpha. \end{aligned}$$

Соотношения (8.31) позволяют заключить, что вообще сферические функции  $Y_{\ell,m}$  представляют собой полиномы  $\ell$ -ой степени по сте-

пеням компонент вектора  $n_i$ . Весь их набор представляет собой тензор  $\ell$ -ого ранга, компоненты которого сходным образом преобразуются друг через друга при вращениях координатной системы<sup>1</sup>.

Теперь вычисление величины  $\int Y_{1m'}^* Y_{1m} d\Omega$  даёт амплитуду вероятности увидеть проекцию момента на ось  $\lambda$ , равную  $m'$ , в состоянии с проекцией момента на ось  $z$ , равной  $m$ , а квадрат этой величины даёт искомую вероятность. В частности, для  $m = 1$  вероятности обнаружить проекции момента на ось  $\lambda$ , равные  $\pm 1$  и  $0$  равны соответственно  $(1 \pm \cos \alpha)^2/4$  и  $(\sin^2 \alpha)/2$ , а для  $m = 0$  такие же вероятности равны соответственно  $(\sin^2 \alpha)/2$  и  $\cos^2 \alpha$ .

Другой способ ответить на второй вопрос доставляет вычисление среднего значения проекционного оператора на соответствующие состояния. Согласно (8.19), операторы проектирования на состояния с  $\ell_\lambda = m'$  для  $m' = \pm 1$  и  $0$  можно записать в виде  $\hat{P}_{\pm 1} = \frac{(\hat{\ell} \mathbf{n})^2 \pm (\hat{\ell} \mathbf{n})}{2}$ ,  $\hat{P}_0 = 1 - (\hat{\ell} \mathbf{n})^2$ . Вычисление среднего значения этих операторов с использованием найденных выше средних вновь приводит к выписанным ранее вероятностям.

## § 8.4. Задачи

1. В соответствии с правилом построения операторов по классическим величинам, выписанным перед (1.5), оператор момента импульса следовало бы писать в симметризованной форме,  $\hat{L} = (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{r}})/2$ . Покажите, что такая операция не даст ничего нового.
2. Покажите, что для векторных операторов  $\hat{A}, \hat{B}$  коммутатор  $[(\hat{A}\hat{B}), \hat{L}_i] = 0$ .
3. Найти средние значения операторов  $L_x^2$  и  $L_y^2$  в состоянии  $|\ell, m\rangle$ . Можно ли одновременно измерить эти величины?
4. 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  $\langle \hat{L} \rangle$  в состояниях  
(а)  $|\ell, m\rangle$ ; (б)  $C(|1, 1\rangle + e^{i\alpha}|1, -1\rangle)/\sqrt{2}$ ; (в)  $C(|1, 1\rangle + e^{i\alpha}|1, 0\rangle)/\sqrt{2}$ .

<sup>1</sup>Это — базис неприводимого представления группы вращений, имеющего размерность  $2\ell + 1$ .

Общий тензор  $\ell$ -го ранга имеет  $\ell^2$  компонент. Их набор образует приводимое представление, которое разбивается на сумму неприводимых.

5. Найти собственные векторы операторов  $\hat{l}_x, \hat{l}_y$  в базисе  $|\ell, \ell_z\rangle$  для  $\ell = 1, 2$ .
6. Используя соотношения (8.6), выясните, при каких  $m, m'$  будет  $\langle m|x_i|m'\rangle \neq 0$ ;  $\langle m|x_ix_j|m'\rangle \neq 0$ .
7. Найти  $\langle \ell_z \rangle$  и вероятности различных значений проекции момента на ось  $z$  в состояниях  $\psi(\varphi) =$  (I)  $A \cos^2 \varphi$ , (II)  $C \cdot e^{i\varphi} \cos^2 \varphi$ , (III)  $B(1 + \cos \varphi)$ . Как меняются со временем средние значения  $\langle \ell_z \rangle$  в случае плоского ротатора  $\hat{H} = \hat{L}_z^2/2I$ ?
8. Ось  $z'$  повернута под углом  $\alpha$  к оси  $z$  (вокруг оси  $y$ ). Для  $\ell = 1$  и  $\ell = 2$
- найти собственные векторы оператора  $\hat{\ell}_{z'}$  в базисе  $|\ell, \ell_z\rangle$ ;
  - в состоянии  $|\ell, m\rangle$  найти вероятности разных значений  $\ell_{z'}$  и  $\ell_{x'}$ , средние  $\langle \hat{\ell}_{z'} \rangle$  и  $\langle \hat{\ell}_{x'} \rangle$ ,  $\langle \hat{\ell}_{z'}^2 \rangle$  и  $\langle \hat{\ell}_{x'}^2 \rangle$ .
- Указание.* Для лучшего понимания удобно воспользоваться выражениями (8.31).
9. С помощью уравнения (8.20b) записать оператор конечного вращения, наподобие (8.22), при  $\ell = 2$ .

## Глава 9

# Центрально–симметричное поле

### § 9.1. Задача двух тел. Общие свойства

Задача двух частиц, взаимодействие которых зависит только от расстояния между ними, описывается гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2).$$

Для описания движения этих 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  $m$ ):

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{R}} &= \frac{m_1 \hat{\mathbf{r}}_1 + m_2 \hat{\mathbf{r}}_2}{m_1 + m_2}, \quad \hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}}_1 + \hat{\mathbf{p}}_2, \quad M = m_1 + m_2, \\ \hat{\mathbf{r}} &= \hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2, \quad \hat{\mathbf{p}} = \frac{m_2 \hat{\mathbf{p}}_1 - m_1 \hat{\mathbf{p}}_2}{m_1 + m_2}, \quad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \end{aligned} \quad (9.1a)$$

Перестановочные соотношения между операторами координат и импульса каждого из этих движений таковы же, как и для отдельной частицы (1.26):

$$[\hat{P}_i, \hat{R}_j] = -i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{p}_i, \hat{r}_j] = -i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{p}_i, \hat{R}_j] = [\hat{P}_i, \hat{r}_j] = 0. \quad (9.1b)$$

Движения двух тел по отдельности входят только в выражение для кинетической энергии. В свою очередь, операторы импульсов разных частиц коммутируют друг с другом. Поэтому — как и в классической механике — эта кинетическая энергия, а вслед за нею и гамильтониан разбиваются на сумму гамильтониана движения центра масс  $\hat{H}_R$  и гамильтониана относительного движения  $\hat{H}_r$ ,

$$\hat{H} = \hat{H}_R + \hat{H}_r, \quad \hat{H}_R = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M}, \quad \hat{H}_r = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}).$$

◇ Движение центра масс (атома в целом) — свободное, оно описывается обычными плоскими волнами.

◇ Относительное движение описывается как движение частицы с приведённой массой  $m$  в поле  $U(\mathbf{r})$  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<sup>1</sup>.

Если  $U(\mathbf{r}) = U(r)$ , т. е. не зависит от направления, то гамильтониан коммутирует с компонентами оператора момента импульса, которые друг с другом не коммутируют:

$$[\hat{\ell}_i, \hat{H}] = 0, \quad [\hat{\ell}_i, \hat{\ell}_j] = ie_{ijk}\ell_k. \quad (9.2)$$

Поэтому, в силу теоремы (2.11), 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  $-\hat{\ell}^2$  (8.25)<sup>2</sup>.

Разделяя переменные, т. е. записав  $\psi = R(r)Z(\theta, \phi)$ , мы воспользуемся для угловой части  $Z$  найденными выше решениями задачи на

<sup>1</sup> Полная волновая функция системы  $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  есть функция двух переменных — положений первой и второй частиц  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$ . Если мы следим только за положением первой частицы, то по положениям второй частицы следует усреднять. Этот пример даёт ещё одну (тривиальную и неудобную для анализа) иллюстрацию понятия матрицы плотности первой частицы  $\rho(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_1) = \int \psi^*(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}_2)\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)d\mathbf{r}_2$ , § 1.11.

<sup>2</sup> Можно ввести оператор радиального импульса  $\hat{p}_r \equiv -i\hbar(\partial/\partial r + 1/r)$  так, что входящий в выписанное уравнение гамильтониан принимает «классический» вид  $\hat{p}_r^2/(2m) + \hat{L}^2/(2mr^2) + V(r)$ . Обращение с этим импульсом требует осторожности, и ниже мы не используем его. Действительно, для привычного оператора импульса в прямоугольных координатах повторный коммутатор  $[\hat{p}_x, [\hat{p}_x, x]] = 0$ . В отличие от этого, отсутствие в природе отрицательных значений  $r$  приводит к тому, что повторный коммутатор  $[\hat{p}_r, [\hat{p}_r, r]]$  не обращается в нуль, а равен  $-\hbar^2\delta(r)$ .

собственные значения

$$\hat{\ell}^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell + 1) Y_{\ell m}(\theta, \phi).$$

В итоге волновая функция принимает вид

$$\psi = R_{\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad (9.3)$$

и для радиальной функции получается уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R_{E\ell} + U_{\text{эф}} R_{E\ell} = E_{\ell} R_{E\ell}, \quad (9.4a)$$

$$U_{\text{эф}} = U(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2mr^2}; \quad r > 0.$$

(Величину  $U_{\text{эф}}$  называют *эффективным потенциалом*, а входящую в него величину  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)/(2mr^2)$  — *центробежным потенциалом*.)

Вопреки ожиданиям, это уравнение не выглядит похожим на одномерное уравнение Шредингера. Однако оно принимает вид обычного одномерного уравнения Шредингера с зависящим от  $\ell$  потенциалом  $U_{\text{эф}}(r)$  для функции

$$\chi_{E\ell} = r R_{E\ell},$$

$$-\frac{d^2 \chi_{E\ell}}{dr^2} + \frac{2m U_{\text{эф}}(r)}{\hbar^2} \chi_{E\ell} = k^2 \chi_{E\ell} \quad \left( k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \chi_{E\ell} = r R_{E\ell} \right) \quad (9.4b)$$

с обычным по виду условием нормировки в дискретном спектре

$$\int_0^{\infty} |R_{E\ell}|^2 r^2 dr = \int_0^{\infty} |\chi_{E\ell}|^2 dr = 1. \quad (9.4c)$$

Условие конечности  $R_{E\ell}(r)$  в нуле выглядит как граничное условие

$$\chi_{E\ell}(r = 0) = 0. \quad (9.4d)$$

Ниже мы нередко используем 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 (разд. 2.6.2). В трёхмерном случае это не так. Граничное условие (9.4d) «выталкивает»

уровень. Если потенциал сосредоточен в области размера  $a$ , где его характерное значение составляет<sup>1</sup>  $\tilde{V}$ ,

$$\boxed{\text{дискретные уровни не существуют при } |\tilde{V}| < \hbar^2/(2ma^2)}. \quad (9.5)$$

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 объёма.

◇ Собственные значения энергии нумеруются, начиная с наименьшего. Поэтому — по определению — с ростом  $n_r$  при фиксированном  $\ell$  энергия состояния возрастает.

◇ Правило дифференцирования энергии по параметру (5.9) даёт:

$$\frac{\partial E_{n_r \ell}}{\partial \ell} = \langle n_r, \ell | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \ell} | n_r, \ell \rangle = \langle n_r, \ell | \frac{\hbar^2(2\ell + 1)}{2mr^2} | n_r, \ell \rangle \geq 0. \quad (9.6)$$

Это означает, в частности, что в центрально-симметричном поле с ростом  $\ell$  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 (9.4b) остаётся 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

$$R_{E\ell} \rightarrow r^\ell \text{ или } \rightarrow r^{-(\ell+1)} \text{ при } r \rightarrow 0. \quad (9.7)$$

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 (9.4b) принимает вид  $\chi''_{k\ell} = -k^2 \chi_{k\ell}$ . Поэтому

$$\begin{aligned} R_{E\ell} &\sim \frac{\sin(kr + \alpha)}{r} && \text{при } E > 0 \left( k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \right), \\ R_{E\ell} &\sim \frac{e^{-\kappa r}}{r} && \text{при } E < 0 \left( \kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \right). \end{aligned} \quad (9.8)$$

<sup>1</sup>Для прямоугольной ямы это условие имеет вид  $U < \pi\hbar^2/(8ma^2)$ , стр. 75. Сравнение показывает, что в нашей оценке для прямоугольной ямы  $\tilde{V} = 4U/\pi$ .

◇ *Терминология.* Величину  $\ell$  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  $n = n_r + \ell + 1$  (это число имеет серьёзный физический смысл только для кулоновской задачи и в полях, слабо отличающихся от кулоновского).

В дальнейшем мы будем обозначать состояния атомных систем значком  $|N\rangle$ , понимая под  $N$  набор квантовых чисел  $n_r, \ell, m$  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 (2.11), это приводит к вырождению. В общем случае состояния в центрально-симметричном поле вырождены  $2\ell + 1$ -кратно.

## § 9.2. Поле, быстро убывающее с расстоянием

Во множестве 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 перестаёт быть обязательным. Мы и разберём в этом параграфе такое «свободное» движение, считая для определённости энергию положительной. Переход к случаю отрицательной энергии описывается соотношением (9.10b).

При  $\ell = 0$  уравнение Шредингера имеет вид  $\chi'' + k^2\chi = 0$ . Выберем два независимых решения этого уравнения (нормированных на  $\delta$ -функцию по шкале  $k$ ):

$$R_{k0}^s(r) \equiv \frac{\chi_k^s(r)}{r} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin kr}{r}, \quad R_{k0}^c(r) \equiv \frac{\chi_k^c(r)}{r} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\cos kr}{r}, \quad (9.9)$$

$$\left( \int \chi_k \cdot \chi_p dr = \delta(k-p) \right).$$

При  $\ell \neq 0$  выделим из  $R_{k\ell}$  множитель  $r^\ell$ :  $R_{k\ell} = r^\ell \phi_\ell(r)$  (9.7). Тогда уравнение Шредингера (9.4b) 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 имеет тот же вид, что и уравнение для  $\phi_{\ell+1}$ . Это означает, что  $\phi_{\ell+1} \propto f(r) = (1/r)(d\phi_\ell/dr)$ . Решая это рекуррентное соотношение, найдём (ниже показана и связь этих решений с функциями Бесселя и Неймана  $J_\alpha(x)$  и  $N_\alpha(x)$ )

$$\begin{aligned} R_{k\ell}^s(r) &= \left(\frac{r}{k}\right)^\ell \left(-\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \left(\frac{\sin kr}{r}\right) \equiv C_n \sqrt{\frac{k}{r}} J_{\ell+1/2}(kr), \\ R_{k\ell}^c(r) &= \left(\frac{r}{k}\right)^\ell \left(-\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \left(\frac{\cos kr}{r}\right) \equiv D_n \sqrt{\frac{k}{r}} N_{\ell+1/2}(kr). \end{aligned} \quad (9.10a)$$

Отметим, что для свободного движения  $\chi(0) = 0$ , остаётся только решение  $R^s$ . (Нормировочные коэффициенты  $C_n$  и  $D_n$  проще всего получить, сравнивая известные асимптотики функций Бесселя при  $x \rightarrow 0$  с (9.11a).)

Точно так же для отрицательных энергий пару независимых решений можно выбрать в виде:

$$R_{\varkappa\ell}^\pm = \left(\frac{r}{\varkappa}\right)^\ell \left(-\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \left(\frac{e^{\pm\varkappa r}}{r}\right). \quad (9.10b)$$

∇ При  $kr \ll 1$  функция  $\sin(kr)/r$  раскладывается в ряд по степеням  $r^2$ , и дифференцирование  $[(1/r)d/dr]^\ell$  «убивает»  $\ell$  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 результате получается выписанная ниже асимптотика при  $kr \ll \ell$ .

∇ 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  $\pi/2$ . Собирая результаты, выпишем асимптотики, согласующиеся с (9.7) и (9.8):

$$R_{k\ell}^s \rightarrow \frac{k(kr)^\ell}{(2\ell+1)!!}, \quad R_{k\ell}^c \rightarrow \frac{(2\ell+1)!!}{r(kr)^\ell} \quad \text{при } kr \ll \ell; \quad (9.11a)$$

$$R_{k\ell}^s \rightarrow \frac{\sin(kr - \ell\pi/2)}{r}, \quad R_{k\ell}^c \rightarrow \frac{\cos(kr - \ell\pi/2)}{r} \quad \text{при } kr \gg \ell. \quad (9.11b)$$

Если поле убывает с ростом расстояния быстрее кулоновского ( $rV(r) \rightarrow 0$ ), то при больших  $r$  движение практически свободное, и волновая функция есть суперпозиция решений (9.10). 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 (9.11):

$$R_{k\ell}(r) \sim \frac{\sin(kr - \ell\pi/2 + \delta_\ell)}{r}. \quad (9.12)$$

Возникший здесь сдвиг фаз  $\delta_\ell$  называют ещё *фазой рассеяния*. Свойства этой фазы обсуждаются в частности при изучении метода парциальных волн в задаче рассеяния § 18.5.

Пример решения радиального уравнения даёт нам компьютерное моделирование, обсуждаемое в прил. А.5.

◇ *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  $U_{\text{эф}}$ , а не  $U$ , при этом центробежное слагаемое при малых  $r$  меняется очень быстро, и условие применимости квазиклассического приближения (6.6a) здесь нарушается. Можно показать [1], что эффект этого нарушения в правиле квантования Бора–Зоммерфельда полностью сводится к замене в  $U_{\text{эф}}$  вклада  $\ell(\ell+1)$  на  $(\ell+1/2)^2$ . Напомним: за счёт центробежного члена обе точки поворота расположены при  $r \neq 0$ .

### § 9.3. Кулоновская задача. Атом водорода

Описание строения атома — важная задача квантовой механики. Для всех атомов такое описание строится по образцу того, что удаётся сделать для простейшего атома — атома водорода с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}. \quad (9.13)$$

Мы обсудим в последующих разделах связанные состояния,  $E < 0$ .

Естественные для задачи единицы это — постоянная тонкой структуры  $\alpha$ , боровский радиус  $a_B$ , и характерное значение энергии — Ридберг<sup>1</sup>  $Ry$ :

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}, \quad a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} \equiv \frac{\hbar}{mc\alpha} = 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ см},$$

$$Ry = \frac{e^2}{2a_B} \equiv \frac{me^4}{2\hbar^2} \equiv \frac{mc^2\alpha^2}{2} = 13,6 \text{ эВ}. \quad (9.14)$$

Соответственно, характерные значения времени  $\tau$ , «скорости» электрона  $v_e$ , электрического поля  $E_a$  и магнитного поля в системе покоя электрона  $B_a$  на «орбите» составляют

$$\tau = \frac{\hbar}{Ry} = 2,4 \cdot 10^{-17} \text{ с}, \quad v_e = c\alpha, \quad E_a = \frac{Ry}{ea_B} = 2,7 \cdot 10^9 \text{ В/см}, \quad B_a = \frac{v}{c} E_a = \alpha E_a.$$

Для понимания свойств состояний с энергией  $|E| \ll 1Ry$  удобно ещё использовать квазиклассическое приближение с эффективным потенциалом  $e^2/r - \hbar^2(L + 1/2)^2/(2mr^2)$ , см. текст на стр. 219 [1].

В безразмерных переменных  $r/a_B \rightarrow r$ ,  $E/Ry \rightarrow -\varkappa^2$  уравнение Шредингера (9.4а) принимает вид

$$\hat{F} R_{\varkappa\ell} = 0, \quad \text{где} \quad \hat{F} = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} + \left( -\varkappa^2 + \frac{2}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right). \quad (9.15)$$

◇ Многие черты качественной картины становятся понятнее, если рассмотреть зависимость эффективного потенциала  $U_{\text{эфф}}$  (9.4а) от расстояния при разных  $\ell$ . Если  $\ell = 0$ , это — обычная кулоновская зависимость, потенциал монотонно растёт от значения  $U_{\text{эфф}} \rightarrow -\infty$  при  $r \rightarrow 0$  до  $U_{\text{эфф}} = 0$  при  $r \rightarrow \infty$ , оставаясь всё время отрицательным. Если  $\ell \neq 0$ , при  $r \rightarrow 0$  в  $U_{\text{эфф}}$  доминирует центробежный член. С ростом  $r$  потенциал быстро падает, достигая минимума при  $r_\ell = \ell(\ell+1)$ , а затем монотонно возрастает до  $U_{\text{эфф}} = 0$  при  $r \rightarrow \infty$  (здесь начинает доминировать кулоновское слагаемое, которое убывает с расстоянием медленнее центробежного).

Перейдём к решению уравнения (9.15). Нам известно поведение  $R_{\varkappa\ell}$  на границах:  $R_{\varkappa\ell} \sim r^\ell$  при  $r \rightarrow 0$  и  $R_{\varkappa\ell} \sim e^{-\varkappa r}$  при  $r \rightarrow \infty$ . Поэтому

<sup>1</sup>Некоторые авторы обозначают значком  $Ry$  вдвое большую величину.

удобно искать решение в виде  $R_{\varkappa\ell} = r^\ell e^{-\varkappa r} w(r)$ . Далее мы ещё разложим  $w(r)$  в ряд:  $w = \sum_0^\infty b_k (2\varkappa r)^k$ . При этом получается уравнение для  $w(r)$ , а из него — рекуррентное соотношение для коэффициентов  $b_k$ :

$$\begin{aligned} R_{\varkappa\ell} &= r^\ell e^{-\varkappa r} w(r) : \\ r w'' + 2(\ell + 1 - \varkappa r) w' + 2(1 - \varkappa - \varkappa \ell) w &= 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow b_{k+1} &= \frac{k + \ell + 1 - 1/\varkappa}{(k + 1)(k + 2\ell + 2)} b_k. \end{aligned} \quad (9.16)$$

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  $w \sim e^{2\varkappa r}$ , а это нарушает граничное условие (условие нормируемости волновой функции)<sup>1</sup>. 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  $w(r)$  — полином степени  $n_r$ . *Радиальное квантовое число*  $n_r$  равно числу нулей функции  $w(r)$ . (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). Ниже важнейшую роль играет *главное квантовое число*  $n = n_r + \ell + 1 = 1/\varkappa$ . Получившиеся полиномы  $w(r)$  называют функциями Лагерра  $L_{n+\ell}^{2\ell+1}$ , их можно найти в таблицах.

В итоге искомые нормированные собственные радиальные функции имеют вид (для  $\varkappa = 1/n$  мы переобозначаем  $R_{\varkappa\ell} \rightarrow R_{n\ell}$ )

$$\begin{aligned} \psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi) &= R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi), \\ R_{n\ell} &= -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{[(n+\ell)!]^3}} \left(\frac{2r}{n}\right)^\ell e^{-r/n} L_{n+\ell}^{2\ell+1} \left(\frac{2r}{n}\right). \end{aligned} \quad (9.17a)$$

В частности, при  $r \ll 1$  (см. [1]),

$$R_{n,\ell} \rightarrow r^\ell \frac{2^{\ell+1}}{n^{2+\ell}(2\ell+1)!} \sqrt{\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}}. \quad (9.17b)$$

<sup>1</sup>При этом  $R_{\varkappa\ell} \propto e^{\varkappa r}$ , 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 (9.16). Некоторые примеры приведены в (В.21), (В.22). На рис. 7 изображены несколько радиальных волновых функций низших состояний атома водорода.

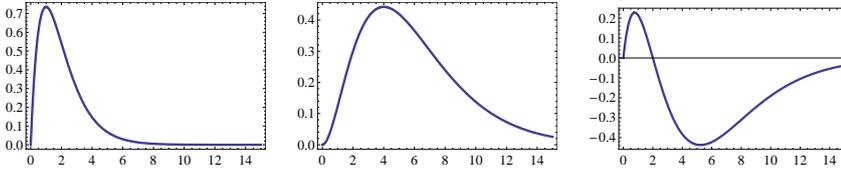


Рис. 7. Радиальные волновые функции  $\chi_{n\ell} = rR_{n\ell}$  в атомных единицах для  $(n, \ell) = (1, 0)$ ,  $(2, 1)$  и  $(2, 0)$  (слева направо)

Отметим, что при  $n \gg \ell$ ,  $r$  из формул [1] легко получается

$$R_{n\ell} \approx \frac{2^{\ell+1}}{n^{3/2}(2\ell+1)!} \cdot \left(\frac{r}{n}\right)^\ell. \quad (9.18)$$

Волновые функции  $\psi_{n\ell m}(r, \theta, \phi)$  описывают состояния, обозначаемые как  $|n\ell m\rangle$ , иначе говоря  $\psi_{n\ell m} = \langle \mathbf{r} | n\ell m \rangle$ .

Состояние с известными  $n$ ,  $\ell$  и любой проекцией момента на ось называют  $n\ell$ , например,  $4f$  — состояние с  $n = 4$ ,  $\ell = 3$ , а  $2p$  — состояние с  $n = 2$ ,  $\ell = 1$  с любым значением  $m$ . Величина энергии основного состояния  $|1, 0, 0\rangle$  есть  $1 \text{ Ry} = 13,6 \text{ эВ}$  — это минимальная энергия, которую надо сообщить находящемуся в основном состоянии электрону, чтобы он оторвался от ядра (*энергия ионизации атома*). Итак<sup>1</sup>,

$$E_n = -\frac{\text{Ry}}{n^2}, \quad (9.19)$$

$$n = n_r + \ell + 1 = 1, 2, 3 \dots, \quad n_r = 0, 1, 2, 3 \dots, \quad \ell = 0, 1, 2, 3 \dots$$

• **Кулоновское вырождение.** Энергии уровней атома водорода зависят только от главного квантового числа  $n$ , но не от  $n_r$  и  $\ell$  по отдельности, как это было бы для почти любого другого сферически

<sup>1</sup>Для последующих оценок полезно сделать некоторые замечания. (а) По теореме о вириале для атома водорода средние значения кинетической и потенциальной энергии в  $n$ -ом состоянии связаны соотношением  $2\langle T_n \rangle = -\langle V_n \rangle$ , т.е.  $\langle T_n \rangle = |E|_n$ . (б) Энергия основного состояния по абсолютной величине совпадает с энергией локализации электрона на характерном размере атома  $|E_1| = \hbar^2/(2ma_B^2)$ .

симметричного потенциала. Уровню  $E_n$  с данным значением  $n$  соответствует  $\sum_0^{n-1} (2\ell + 1) = n^2$  различных состояний (различных волновых функций) с  $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$ . Состояния с определённой энергией — суперпозиции состояний с разными  $\ell$  уже не имеют определённой чётности. Это более сильное вырождение, чем для обычной задачи с центрально-симметричным потенциалом (см. обсуждение на стр. 217). Такое сильное вырождение означает, что кулоновская задача (как и в классическом случае) обладает более высокой симметрией, чем симметрия группы трёхмерных вращений  $O(3)$ , только и имеющая место для большинства остальных задач с центральной симметрией (см. § 9.4). Подобная повышенная симметрия имеет место и для трёхмерного изотропного осциллятора,  $U(r) = kr^2/2$ .

В действительности каждое из найденных состояний ещё 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 ионы** — 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 в  $Z$  раз, а энергии состояний  $|E_n|$  увеличиваются в  $Z^2$  раз по сравнению с атомом водорода. Обратите внимание, что характерная скорость электрона «на орбите» оказывается для такого атома  $Z\alpha c$ , т. е. для внутренних электронов тяжёлых ядер (например, свинца  $Pb$  с  $Z = 82$ ) эта скорость уже близка к скорости света. Для таких объектов используемое нами нерелятивистское описание можно использовать при оценках, а для точных вычислений оно становится неприменимым.

◆ **Примеры. Частные случаи**

◇ Полезные для многих задач средние  $\langle r^k \rangle_{n\ell}$  вычислены в Приложении § В.4.

◇ Для состояний с  $\ell = n-1$  имеем  $n_r = 0$ , поэтому  $w$  — постоянная. В частности, для *основного состояния* атома водорода  $1s$

$$\psi_{100}(r, \theta, \phi) \equiv \langle \mathbf{r} | 1, 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}. \quad (9.20)$$

Для этого состояния легко вычислить  $\langle r \rangle = 3/2$ ,  $\Delta r / \langle r \rangle = 1/\sqrt{3}$ . Видно, что здесь 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  $L = \hbar$ ).

◇ *Первый возбуждённый уровень  $n = 2$ .* Радиальные волновые функции (9.17) приведены выше (и показаны на рис. 7), но вместо использования этих общих выражений удобно заново вычислить необходимые векторы состояний с помощью (9.16) и (8.31):

$$2s: \langle \mathbf{r} | 2, 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} (1 - r/2) e^{-r/2}, \quad (9.21)$$

$$2p: \begin{cases} \langle \mathbf{r} | 2, 1, \pm 1 \rangle = \frac{\mp i}{8\sqrt{\pi}} r e^{-r/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}, \\ \langle \mathbf{r} | 2, 1, 0 \rangle = \frac{i}{\sqrt{32\pi}} r e^{-r/2} \cos \theta. \end{cases} \quad (9.22)$$

◇ Ситуация при больших  $n$  описывается формулами (В.26). При  $\ell = m = n - 1 \gg 1$  квантовая механика даёт ответ, близкий к боровской модели. А именно, средний радиус велик  $\langle r \rangle = n^2$ , относительная дисперсия мала  $\Delta r / \langle r \rangle = 1/\sqrt{2n+1} \ll 1$ , 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. 8.

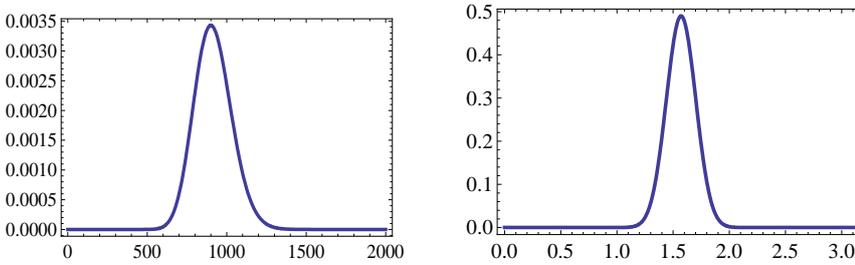


Рис. 8. Квадраты радиальной волновой функции  $|\chi_{n,\ell=30,29}(r)|^2$  в атомных единицах (слева) и угловой зависимости  $|Y_{\ell=m=29}(\theta)|^2$ . Обратите внимание на нормировку  $Y_{\ell,m}$ .

Ценность полуклассической боровской модели не исчерпывается случаем больших  $n$  и  $\ell$ . Представление об орбитах и их радиусах позволяет получать правильные оценки и в случаях, когда  $n$  и  $\ell$  не очень велики. Разумеется, точность оценок не очень высока.

Наконец, при  $\ell = 0$  даже больших  $n$  полуклассическая картина вообще работает неважно. В соответствии с (В.26), при этом  $\langle r \rangle = 3n^2/2$ , а  $\frac{\Delta r}{\langle r \rangle} = \frac{1}{3} \sqrt{1 + \frac{2}{n^2}}$ , т. е. электрон практически не локализован.

◇ Состояния с большими  $n$  называют *Ридберговскими*. В этих состояниях «размер» атома  $\langle r \rangle$  становится очень большим, а расстояния между уровнями  $E_n - E_{n+1} \approx 2Ry/n^3$  очень малыми. Для  $n = 40$  «размер» атома водорода достигает  $a_B n^2 = 0.08$  мкм, а расстояние между его уровнями 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 в газе малой плотности при низких (гелиевых) температурах.

• **Спектральные линии.** Энергия фотона, излучённого при переходе  $|n_i \ell_i m_i\rangle \rightarrow |n_f \ell_f m_f\rangle$  — это  $Ry \left(1/n_f^2 - 1/n_i^2\right) = \hbar\omega$ . Для  $n_f = 1$  мы имеем серию Лаймана в ультрафиолетовой области спектра, для  $n_f = 2$  — серию Бальмера (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.

• Вычислим поправку к энергии атома водорода, обусловленную отличием полной релятивистской кинетической энергии от классического значения:

$$\hat{p}^2/2m \rightarrow \sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 = \hat{p}^2/2m - \hat{p}^4/8m^3 c^2 + \dots \quad (9.23a)$$

Воспользуемся соотношением  $\frac{\hat{p}^2}{2m} = \hat{H}_0 + \frac{e^2}{r}$  с невозмущённым гамильтонианом атома водорода  $\hat{H}_0$ . Тогда поправку к энергии (9.19) можно записать в виде среднего по невозмущённым состояниям атома водорода  $|n\ell m\rangle$ :

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{rel}} &= \langle n\ell m | \delta_{\text{rel}} H | n\ell m \rangle \equiv -\frac{1}{2mc^2} \left\langle n\ell m \left| \left( \hat{H}_0 + \frac{e^2}{r} \right)^2 \right| n\ell m \right\rangle \equiv \\ &\equiv -\frac{1}{2mc^2} \left\langle n\ell m \left| \left( \hat{H}_0^2 + 2\hat{H}_0 \frac{e^2}{r} + \left( \frac{e^2}{r} \right)^2 \right) \right| n\ell m \right\rangle. \end{aligned}$$

Поскольку  $\hat{H}_0 |n\ell m\rangle = E_n \equiv -Ry/n^2$ , то среднее значение оператора  $\hat{H}_0^2$  есть  $Ry^2/n^4$ . Согласно теореме о вириале (В.23a), среднее значение

потенциальной энергии равно в нашем случае  $2E_n$ . Поэтому среднее значение произведения  $2\hat{H}_0 \frac{e^2}{r}$  есть  $-4E_n^2 = -4Ry^2/n^4$ . Среднее значение последнего слагаемого в скобках  $(e^2/r)^2$  вычисляется с помощью (В.23с), это есть  $\frac{e^4}{n^3(\ell+1/2)a_B^2} \equiv \frac{4Ry^2}{n^3(\ell+1/2)}$ . Собирая эти ответы и используя соотношение (9.14) для отношения  $Ry/(mc^2)$ , мы получаем

$$\begin{aligned} -\Delta E_{\text{rel}} &= \left\langle \frac{\hat{p}^4}{8m^2c^3} \right\rangle = \frac{Ry^2}{2mc^2} \left( \frac{1}{n^4} - \frac{4}{n^4} + \frac{4}{n^3(\ell+1/2)} \right) = \\ &= \frac{\alpha^2}{n^3} \left( \frac{1}{\ell+1/2} - \frac{3}{4n} \right) Ry. \end{aligned} \quad (9.23b)$$

### 9.3.1. Атомы и молекулы в электрическом поле

Характерное электрическое поле в атоме  $\mathcal{E}_{\text{at}} \sim Ry/ea_B \approx 3 \cdot 10^9 \text{ В/см}$ , это значительно больше любого поля, которое создают в лаборатории. Поэтому влияние внешнего электрического поля на атом всегда можно считать малым, и при вычислении использовать теорию возмущений. Кроме того, в большинстве физически интересных задач в пределах атомной системы изменение внешнего поля ничтожно, т. е. можно считать это поле однородным. Сдвиг спектральных линий в электрическом поле называют *эффектом Штарка*. Мы обсудим ниже общие черты эффекта для различных веществ и выполним подробные вычисления для атома водорода.

Изменение энергии нейтрального атома под действием внешнего электрического поля  $\mathcal{E}$  (возмущение) имеет вид  $V = -(\mathbf{d}\mathcal{E})$ , где  $\mathbf{d}$  — оператор дипольного момента атома, являющийся полярным вектором, для атома водорода  $\mathbf{d} = e(\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_e) \equiv -e\mathbf{r}$ . Как обычно, мы направляем ось  $z$  вдоль поля  $\mathcal{E}$ . При этом оператор возмущения принимает вид  $V = e\mathcal{E}z$ . Основное состояние атома водорода чётно (момент импульса равен нулю, и  $P = (-1)^\ell = 1$ ). Согласно (5.6), поправка к энергии уровня в первом порядке по возмущению есть

$$\int \psi_0^*(\mathbf{r}) V \psi_0(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \equiv e\mathcal{E} \int \psi_0^*(\mathbf{r}) z \psi_0(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}. \quad (9.24)$$

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. Иными словами, поправка к энергии первого порядка теории возмущений  $V_{NN}$ , линейная по полю, обращается в нуль.

◆ Этот вывод почти без изменений переносится на все состояния других атомов. Действительно, в них каждый электрон находится в сферически симметричном, но отличном от поля точечного заряда, поле ядра, в сумме с полем и остальных электронов. Поэтому в них нет дополнительного, кулоновского вырождения, и состояния обладают определённой чётностью  $(-1)^\ell$ , и, стало быть, поправка первого порядка (простое обобщение (9.24)) обращается в нуль.

◆ Но как совместить с этим тот факт, что у большинства газов и почти всех твёрдых тела и жидкостей диэлектрическая проницаемость  $\bar{\epsilon}$  заметно отличается от 1, т. е. в слабом электрическом поле  $\mathcal{E}$  энергия состояния почти любой такой системы пропорциональна  $\mathcal{E}$ ?

Ответ состоит в том, что в молекуле сферическая симметрия обычно отсутствует, часто существует выделенное направление (например, от ядра к ядру в двухатомной молекуле). Система при отражении меняется — чётность не является сохраняющейся величиной, и поправка первого порядка к энергии не исчезает. В итоге для достаточно плотных веществ  $\bar{\epsilon} - 1 \sim 1$ .

• **Линейный эффект Штарка для атома водорода с  $n = 2$ .**

Рассуждение об отсутствии линейного эффекта Штарка в атоме не работает и для атома водорода при  $n > 1$ , когда имеется дополнительное вырождение по  $\ell$ , т. е. и по чётности. Электрическое поле снимает это вырождение, и изменение энергии уровней пропорционально полю. Под действием электрического поля атом переходит в состояния, которые не являются собственными функциями  $\ell$ .

Простейший пример — состояние с  $n = 2$ . (Случаи  $n = 3, 4$  обсуждаются в задаче 9.18.) В отсутствие поля четыре вырожденных состояния с  $\ell = 0$  и  $\ell = 1$  образуют базис состояний, имеющих определённые чётности (9.21), (9.22). Мы обозначим их  $|I\rangle \equiv |2, 0, 0\rangle$ ,  $|II\rangle \equiv |2, 1, 0\rangle$ ,  $|III\rangle \equiv |2, 1, 1\rangle$ ,  $|IV\rangle \equiv |2, 1, -1\rangle$ . Удобно записать оператор возмущения в виде матрицы (9.25). Поясним происхождение её элементов.

◇ Сначала дадим «арифметическое» объяснение, использующее явный вид

$$\begin{pmatrix} & |I\rangle & |II\rangle & |III\rangle & |IV\rangle \\ \langle I| & 0 & i\Delta & 0 & 0 \\ \langle II| & -i\Delta & 0 & 0 & 0 \\ \langle III| & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \langle IV| & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (9.25)$$

волновых функций (9.21), (9.22) и выражение  $z = r \cos \theta$ . Как уже говорилось, все диагональные матричные элементы возмущения обращаются в ноль. Рассмотрим далее недиагональные элементы.

Начнём с элемента  $V_{I,III}$ . Запишем его в явном виде (с точностью до нормировки)

$$V_{I,III} \propto \int (1 - r/2) e^{-r/2} r \cos \theta r e^{-r/2} \sin \theta e^{i\phi} r^2 dr \sin \theta d\phi.$$

Азимутальное интегрирование здесь даёт  $\int e^{i\phi} d\phi = 0$ . Таким образом,  $V_{I,III} = 0$ . Такое же вычисление даёт  $V_{II,III} = 0$ . Замена  $e^{i\phi} \rightarrow e^{-i\phi}$  даёт  $V_{I,IV} = V_{II,IV} = 0$ . Наконец, сходный интеграл для  $V_{III,IV}$  содержит множитель  $\int e^{2i\phi} d\phi = 0$ . Прямому вычислению подлежит

$$V_{I,II} = \frac{i}{\sqrt{8\pi} \cdot \sqrt{32\pi}} \int (1 - r/2) e^{-r/2} r \cos \theta r e^{-r/2} \sin \theta d\phi = i\Delta, \quad \Delta = 3.$$

Переход от атомных единиц к обычным и учёт множителей  $e\mathcal{E}$  в определении оператора возмущения даёт  $\Delta \rightarrow 3e\mathcal{E}a_B$ . Остальные элементы матрицы получаются с помощью эрмитова сопряжения.

◇ Поучительно повторить сказанное на немного более формальном языке. Под действием возмущения  $V = e\mathcal{E}z \equiv e\mathcal{E}r \cos \theta$  величина  $\ell_z$  сохраняется. Значит, матричные элементы  $\langle 2, \ell, 0 | V | 2, 1, \pm 1 \rangle$  и  $\langle 2, \ell, \mp 1 | V | 2, 1, \pm 1 \rangle$  обращаются в ноль. В остальные два матричных элемента входят состояния с противоположными чётностями и одинаковым значением  $m = 0$ . Поэтому они отличны от нуля:

$$\langle 2, 1, 0 | V | 2, 0, 0 \rangle = \langle 2, 0, 0 | V | 2, 1, 0 \rangle^* = i\Delta, \quad \Delta = 3e\mathcal{E}a_B.$$

◆ Решения получившегося секулярного уравнения

$$(E^{(1)})^2 [(E^{(1)})^2 - \Delta^2] = 0$$

дают искомый сдвиг уровней в электрическом поле. Два состояния  $|2, 1, \pm 1\rangle \equiv III, IV$  не смешиваются, для них  $E_{1,2}^{(1)} = 0$ . Два других состояния  $|2, \ell, 0\rangle$  смешиваются, и уровни сдвигаются, обеспечивая линейный эффект Штарка:  $E_{I',II'}^{(1)} = \pm\Delta$ . Получившиеся новые базисные состояния имеют вид

$$\left| \begin{array}{c} I' \\ II' \end{array} \right\rangle = \frac{|2, 0, 0\rangle \mp |2, 1, 0\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Итак, наше возмущение снимает вырождение частично — четырёхкратно вырожденное состояние (квартет) расщепилось на два синглета и один дублет.

• **Поляризуемость водорода в основном состоянии.**

Поправка к энергии основного состояния атома большинства атомов даётся выражением второго порядка теории возмущений (5.7), т. е. она квадратична по полю  $\mathcal{E}$ . В частности, для атома водорода эта поправка имеет вид:

$$\begin{aligned} \Delta E \equiv E^{(2)} &= \sum_{p \neq 0} \frac{|\langle 0 | \mathbf{d} \mathcal{E} | p \rangle|^2}{E_0^0 - E_p^0} \equiv -\beta_P a_B^3 \frac{\mathcal{E}^2}{2}, \\ \beta_P &= \frac{2e^2}{a_B^3} \sum_{p \neq 0} \frac{\langle 0 | z | p \rangle \langle p | z | 0 \rangle}{E_p^0 - E_0^0} \equiv \frac{2e^2}{a_B^3} \sum_{p \neq 0} \frac{|\langle 0 | z | p \rangle|^2}{E_p^0 - E_0^0}. \end{aligned} \quad (9.26)$$

Величина  $\alpha \equiv \beta_P a_B^3$  называется *поляризуемостью*. Обратите внимание, что величина  $\beta_P$  безразмерна, и в вычислениях можно использовать атомные единицы, т. е. в частности измерять все энергии в  $Ry = e^2/(2a_B)$ . Тогда в атомных единицах

$$\beta_P = 4 \sum_{p \neq 0} \frac{|\langle 0 | z | p \rangle|^2}{E_p^0 - E_0^0}.$$

Все слагаемые этой суммы положительны, и все знаменатели заметно больше первого. Поэтому простейшую грубую оценку этой суммы даёт её первый член. Это  $2^{19}/3^{11} \approx 2.96$ . Но можно получить и более аккуратные оценки, не прибегая к детальным вычислениям.

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,  $\beta_P < 4 \sum_{p \neq 0} \frac{|\langle 0 | z | p \rangle|^2}{E_1^0 - E_0^0}$ . Учитывая, что  $\langle 0 | z | 0 \rangle = 0$ , сумму в числителе можно преобразовать, используя полноту системы состояний  $|p\rangle$ , к виду

$$\sum_{p \neq 0} |\langle 0 | z | p \rangle|^2 \equiv \sum_{p \neq 0} \langle 0 | z | p \rangle \langle p | z | 0 \rangle = \langle 0 | z^2 | 0 \rangle.$$

Если пренебречь состояниями непрерывного спектра (дающими

очень малый вклад в сумму<sup>1</sup>), то наибольший возможный знаменатель получается при  $E_p = 0$ . В итоге получаем оценку

$$4 \frac{\langle 0|z^2|0\rangle}{|E_0|} \lesssim \beta_P < 4 \frac{\langle 0|z^2|0\rangle}{E_1 - E_0}. \quad (9.27)$$

В атоме водорода  $|E_0| = 1$ ,  $E_1 - E_0 = 3/4$ , и с помощью волновой функции (9.20) нетрудно вычислить, что  $\langle 0|z^2|0\rangle = 1$ . В итоге наша оценка принимает вид  $4 \lesssim \beta_P < 16/3$ . Точный расчёт даёт  $\beta_P = 4,5$ , это примерно в 1,5 раза превышает вклад первого слагаемого.

◇ Для произвольного атома вычисление поляризуемости следует дополнить вычислением сдвига уровней, обусловленного квадратичным по полю слагаемым в гамильтониане  $H_2$  (11.12). Для атома водорода этот вклад мал.

### 9.3.2. Взаимодействие нейтральных атомов. Силы Ван-дер-Ваальса

Рассмотрим теперь взаимодействие нейтральных атомов, находящихся на расстоянии  $R$ , большом по сравнению с их размерами. Здесь можно пользоваться *адиабатическим приближением*. Это приближение основано на малости отношения массы электрона к массе атома как целого. Мы следим за «быстрым» движением взаимодействующих электронов, считая движение атомов в целом медленным. В этом приближении мы считаем, что на электроны каждого из атомов другой атом воздействует как целое, и атомы не обмениваются электронами.

На больших расстояниях  $R$  два атома взаимодействуют как диполи  $\mathbf{d}_i = e\mathbf{r}_i$  ( $i = 1, 2$ ), и потенциальная энергия взаимодействия

$$\hat{V} = \frac{3(\mathbf{d}_1 \mathbf{n})(\mathbf{d}_2 \mathbf{n}) - \mathbf{d}_1 \mathbf{d}_2}{|\mathbf{R}|^3} \equiv \frac{d_{1\alpha} d_{2\beta}}{R^3} N_{\alpha\beta} \equiv \text{Ry} \left( \frac{a_B}{R} \right)^3 \cdot \hat{V},$$

$$(\mathbf{n} = \mathbf{R}/R, \quad N_{\alpha\beta} = 3n_\alpha n_\beta - \delta_{\alpha\beta}).$$

Поправку к энергии основного состояния за счёт взаимодействия можно записать в виде

$$U(R) = \sum \frac{\langle 0|V|n_1 n_2\rangle \langle n_1 n_2|V|0\rangle}{2E_0 - E_{n_1} - E_{n_2}} \equiv -2\text{Ry} \eta_V \left( \frac{a_B}{R} \right)^6.$$

<sup>1</sup>Связанное 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.

Угловое усреднение с учётом сферической симметрии атомов даёт

$$\eta_V = \frac{3}{a_B^6 \text{Ry}} \sum_{pq} \frac{|\langle 0|d_{1z}^2|p\rangle|^2 |\langle 0|d_{2z}^2|q\rangle|^2}{E_p + E_q - 2E_0}. \quad (9.28)$$

Вычисление, подобное сделанному для поляризуемости, приводит к неравенствам

$$\frac{3}{2\text{Ry}a_B^6} \frac{\langle 0|d_z^2|0\rangle^2}{E_1 - E_0} > \eta_V \gtrsim \frac{3}{2\text{Ry}a_B^6} \frac{\langle 0|d_z^2|0\rangle^2}{|E_0|}.$$

Для взаимодействия двух атомов водорода в основном состоянии это даёт  $8 > \eta \gtrsim 6$ . Аккуратный расчёт даёт  $\eta_V \approx 6,5$ .

### § 9.4. Повышенная симметрия некоторых трёхмерных систем

Немного ранее мы обнаружили, что собственные состояния кулоновской задачи и изотропного трёхмерного осциллятора имеют более высокую степень вырождения, чем даёт общая задача о сферически симметричном потенциале. В соответствии с (2.11) это означает, что такие системы обладают более высокой симметрией, чем симметрия группы трёхмерных 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 соответствующая симметрия приводит к совпадению периодов радиального движения и движения по углу, при этом траектория замкнута (эллипс) — в отличие от общего случая, когда эти периоды не совпадают, и траектория не замыкается.)*

Чтобы убедиться в существовании «оснований для дополнительного вырождения», в соответствии с (2.11) достаточно только обнаружить операторы, которые коммутируют с гамильтонианом (т. е. сохраняются) и не коммутируют с компонентами момента импульса. Этим мы и ограничиваемся для изотропного трёхмерного осциллятора. Для кулоновской задачи мы ещё и найдём с помощью этих дополнительных сохраняющихся операторов уровни энергии и кратность их вырождения, не прибегая к решению дифференциального уравнения.

### 9.4.1. Изотропный осциллятор

Трёхмерный симметричный осциллятор  $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + m\omega^2\mathbf{r}^2/2$  мы рассмотрим сначала как набор трёх независимых осцилляторов для каждой из координатных осей 1, 2, 3  $\equiv x, y, z$ . Собственное состояние в этом базисе мы обозначим  $|n_1, n_2, n_3\rangle \equiv |n_1\rangle|n_2\rangle|n_3\rangle$ . Вводя операторы рождения и уничтожения для движения по каждой из осей (гл. 4), перепишем гамильтониан в виде

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{N} + 3/2 \right), \quad \hat{N} = \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 + \hat{a}_3^\dagger \hat{a}_3. \quad (9.29)$$

▽ 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 подсчёт 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<sup>1</sup>, достаточно просуммировать кратности вырождений перечисленных значений  $\ell$  и сравнить с величиной  $K$ .

▽ Наконец, при чётном  $n$  состояния чётны, при нечётном  $n$  — нечётны. Действительно, при чётном  $n$  либо все числа  $n_i$  — чётные, тогда при отражении координат все волновые векторы не меняют знак. Другая возможность — например  $n_2$  чётно, а  $n_1$  и  $n_3$  нечётны. Тогда при отражении  $|n_2\rangle$  не меняет знак, а каждый из векторов  $|n_1\rangle$  и  $|n_3\rangle$  меняет знак так, что их произведение  $|n_1, n_2, n_3\rangle$  сохраняется. Точно так же, при нечётном  $n$  либо все числа  $n_i$  — нечётные, либо одно из них нечётно, а два — чётные. В обоих случаях произведение собственных векторов  $|n_1\rangle|n_2\rangle|n_3\rangle$  при отражении меняет знак, т. е. нечётно.

◇ Операторы дополнительных сохраняющихся величин можно выбрать в виде

$$\hat{A}_{i,j} = \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i - \delta_{ij} \hat{N} / 3. \quad (9.30)$$

Отметим, что этих операторов по виду 9, но независимых среди них только 8, поскольку след составленной из этих операторов матрицы равен нулю. Компоненты вектора момента импульса отвечают только трем из этих операторов,  $\hat{\ell}_3 = -i(\hat{A}_{1,2} - \hat{A}_{2,1})$ ,  $\hat{\ell}_1 = -i(\hat{A}_{2,3} - \hat{A}_{3,2})$ ,

<sup>1</sup>Поучительно начать с составления таблицы наборов  $n_1, n_2, n_3$  при различных  $n$  и увидеть для каждого  $n$  кратность вырождения и возможные значения  $\ell$ .

$\hat{\ell}_2 = -i(\hat{A}_{3,1} - \hat{A}_{1,3})$  — ср. (4.34). Существование ещё пяти некоммутирующих друг с другом и с  $\hat{\ell}_i$  сохраняющихся операторов и приводит (на алгебраическом языке) к появлению дополнительного вырождения<sup>1</sup>.

Коммутативность, например, оператора  $\hat{A}_{2,3}$  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  $\hat{A}_{i,j}$  друг с другом легко устанавливаются, это

$$[\hat{A}_{i,j}, \hat{A}_{k,\ell}] = \delta_{i\ell}\hat{A}_{k,j} - \delta_{kj}\hat{A}_{i,\ell}. \quad (9.31)$$

Эти перестановочные соотношения совпадают с перестановочными соотношениями *генераторов* группы унитарных матриц 3-го порядка с равным нулю следом, которую называют группой  $SU(3)$ . Эта симметрия — более высокая, чем симметрия группы трёхмерных вращений  $O(3)$  или изоморфная ей группа унитарных матриц 2-го порядка с равным нулю следом  $SU(2) \subset SU(3)$ .

#### 9.4.2. Кулоновская задача. Метод Паули

*Излагаемый метод был разработан В. Паули в 1926 г., ранее получения стандартного ныне решения уравнения Шредингера, § 9.3. Групповая интерпретация решения найдена В.А. Фоком в 1935 г.*

Для кулоновской задачи три дополнительных сохраняющихся оператора — три компоненты квантового аналога вектора Рунге–Ленца–Лапласа (сохраняющегося в классической механике)<sup>2</sup>

$$\hat{\mathbf{D}} = -e^2 \frac{\mathbf{r}}{r} + \frac{[\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}}] - [\hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}]}{2m}, \quad [\hat{D}_i, \hat{H}] = 0. \quad (9.32)$$

Сохранение этого оператора, т. е. его коммутативность с гамильтонианом, проверяется простым вычислением. (Напомним, что в классической механике этот вектор направлен вдоль большой полуоси эллиптической траектории частицы.)

<sup>1</sup>Из этих пяти некоммутирующих друг с другом и с  $\hat{\ell}_i$  сохраняющихся операторов удобно сформировать симметричный тензор, похожий на тензор квадрупольного момента (*только похожий!*)  $\hat{U}_{ij} = (\hat{A}_{i,j} + \hat{A}_{j,i})/2$ .

<sup>2</sup>Сравнивая с классическим вектором того же наименования, читатель обнаружит здесь симметризацию в соответствии с рецептом, обсуждавшимся перед (1.5).

Известные нам перестановочные соотношения любого векторного оператора с компонентами вектора момента импульса (8.3), (8.6) в нашем случае имеют вид

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar e_{ijk} \hat{L}_k, \quad [\hat{L}_i, \hat{D}_j] = i\hbar e_{ijk} D_k. \quad (9.33)$$

Это означает, что наряду с моментом импульса существуют ещё сохраняющиеся операторы, не коммутирующие с компонентами момента, и выполняются условия для дополнительного вырождения (2.11).

• Дальнейшие вычисления имеют целью получить энергетический спектр атома водорода без решения дифференциального уравнения.

Прямым вычислением нетрудно убедиться, что наряду с перестановочными соотношениями (9.33) выполняются ещё соотношения

$$[\hat{D}_i, \hat{D}_j] = -2i\hbar \hat{H} e_{ijk} \hat{L}_k / m. \quad (9.34)$$

Рассмотрим далее состояния дискретного спектра с *фиксированной* (отрицательной) энергией  $-\varepsilon$ . Для этих состояний в наши перестановочные соотношения мы подставим  $\hat{H} \rightarrow -\varepsilon$  и изменим нормировку оператора  $\hat{\mathbf{D}}$ , обозначив  $\hat{\mathbf{G}} = -\hat{\mathbf{D}}\sqrt{(m/2\varepsilon)}/\hbar$ . Полный набор остающихся перестановочных соотношений (9.33), (9.34) принимает вид:

$$[\hat{\ell}_i, \hat{\ell}_j] = ie_{ijk} \ell_k, \quad [\hat{\ell}_i, \hat{G}_j] = ie_{ijk} G_k, \quad [\hat{G}_i, \hat{G}_j] = ie_{ijk} \ell_k. \quad (9.35)$$

Получившиеся соотношения обнаруживают симметрию между векторами  $\hat{\ell}$  и  $\hat{\mathbf{G}}$ . Они в точности совпадают с перестановочными соотношениями компонент четырёхмерного евклидова тензора момента импульса, в котором компоненты вектора  $\hat{\ell}$  отвечают обычным трёхмерным вращениям, а компоненты вектора  $\hat{\mathbf{G}}$  отвечают вращениям в плоскостях  $(x_i, x_4)$  (приложение В.7). Это означает, что трёхмерная кулоновская задача обладает группой симметрии четырёхмерных вращений  $O(4)$ , которая включает в себя группу трёхмерных вращений  $O(3)$  как подгруппу.

◇ Перейдём к вычислению спектра энергий кулоновской задачи. Выищем сначала два тождества, проверяемых без особого труда:

$$(\hat{\ell} \hat{\mathbf{G}}) = (\hat{\mathbf{G}} \hat{\ell}) = 0, \quad \hat{\ell}^2 + \hat{\mathbf{G}}^2 + 1 = \frac{\text{Ry}}{\varepsilon}. \quad (9.36)$$

Введем теперь два новых векторных оператора

$$\hat{v}_i^{(\pm)} = \frac{1}{2} (\hat{\ell}_i \pm \hat{G}_i) \quad (9.37)$$

и убедимся, что перестановочные соотношения между компонентами каждого из них по отдельности точно такие же, как и для компонент оператора момента импульса, а друг с другом они коммутируют,

$$[\hat{v}_i^{(\pm)}, \hat{v}_j^{(\pm)}] = ie_{ijk}v_k^{(\pm)}, \quad [\hat{v}_i^{(+)}, \hat{v}_j^{(-)}] = 0. \quad (9.38)$$

Поскольку  $(\boldsymbol{\ell} \mathbf{G}) = (\mathbf{G} \boldsymbol{\ell}) = 0$ , то  $(\hat{\mathbf{v}}^{(+)})^2 = (\hat{\mathbf{v}}^{(-)})^2 = (\boldsymbol{\ell}^2 + \mathbf{G}^2)/4$ . Поэтому собственные значения операторов  $(\mathbf{v}^{(+)})^2$  и  $(\mathbf{v}^{(-)})^2$  совпадают. В силу первого соотношения (9.38), собственные значения каждого из этих операторов вычисляются точно так же, как и собственные значения оператора квадрата момента импульса в § 8.1, это  $v^{(\pm)}(v^{(\pm)} + 1)$ , мы обозначим далее  $v^{(+)} = v^{(-)} = v$ , причём в отсутствие прямой связи введённых операторов с углами вращения, целыми должны быть только значения  $2v$ , а не  $v$  (8.16).

Подставляя эти собственные значения во второе равенство (9.36), получим результат, совпадающий с (9.19) с точностью до обозначений:

$$4v(v+1) + 1 = \frac{Ry}{\varepsilon} \Rightarrow \varepsilon = \frac{Ry}{(2v+1)^2} \equiv \frac{Ry}{n^2}, \quad \text{где } n = 2v + 1. \quad (9.39)$$

Убедимся, что наш подход даёт 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 составляет  $(2v + 1)(2v + 1) = n^2$ .

∇ **Возможные значения полного момента.** Напомним, что  $\hat{\boldsymbol{\ell}} = \hat{\mathbf{v}}^{(+)} + \hat{\mathbf{v}}^{(-)}$  при заданных  $v^{(+)} = v^{(-)} = v$ . Это соотношение может реализовываться при различных относительных ориентациях векторов  $\mathbf{v}^{(+)}$  и  $\mathbf{v}^{(-)}$ . В итоге орбитальный момент  $\boldsymbol{\ell}$  пробегает все целочисленные значения от 0 до  $2v = n - 1$  (см. подробное обсуждение сходного вопроса в § 12.1).

∇ **Чётность.** Оператор  $\hat{\mathbf{G}}$  не коммутирует с оператором пространственного отражения, поэтому общие собственные состояния гамильтониана и любого из операторов  $\hat{G}_i$  не имеют определённой чётности.

### § 9.5. Задачи

1. Для прямоугольной сферически симметричной потенциальной ямы докажите условие (9.5), рассмотрите предельный переход  $U \rightarrow \infty$ ,  $a \rightarrow 0$ . При каком условии в пределе остаётся связанное состояние?
2. Могут ли быть в центрально-симметричном поле уровни с кратностью вырождения 2, 7, 9?
3. Определить уровни энергии  $E_{n\ell}$  электрона с моментом  $\ell$ , заключённого в непроницаемую сферу радиуса  $R$ , используя квазиклассическое правило квантования. Сравнить с точным решением при больших  $R$  и  $n \gg \ell$ .
4. Используя квазиклассическое правило квантования, найти полное число уровней в поле  $U = \{a(1/b - 1/r) \text{ при } r < b, \quad 0 \text{ при } r > b.\}$

#### • Осциллятор

5. Для изотропного плоского осциллятора  $U = m\omega^2(x^2 + y^2)/2$  найти уровни энергии и кратность их вырождения.
6. Для изотропного сферического осциллятора  $U = m\omega^2 r^2/2$ 
  - а) получить кратность вырождения, приведённую на стр. 232;
  - б) в квазиклассическом приближении найти уровни энергии, найти минимальное значение энергии при заданном  $\ell$ ;
  - в) найти 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;
  - г) найти поправки к трём нижним уровням энергии под действием возмущения  $V = \gamma x^2 y^2$ .
  - д) найти поправки к трём нижним уровням энергии под действием возмущений  $V_a = 2\gamma xy$  и  $V_b = \gamma(x^2 - y^2)$ .

#### • Атом водорода и пр.

7. Оценить размеры и уровни энергии водородоподобных атомов  ${}^2\text{He}^+$ ,  ${}^3\text{Li}^{++}$ ,  ${}^{82}\text{Pb}^{81+}$ ,  $e^+e^-$ ,  $\mu^-p$ ,  $\mu^-p^+$ ,  $\mu^-$   ${}^{82}\text{Pb}^{81+}$  (цифра внизу слева — атомный номер, т.е. заряд ядра,  ${}^{82}\text{Pb}$  — ядро свинца).
8. Найти радиальную функцию  $R_{20}(r)$  из условия её ортогональности к функции  $R_{10}(r)$ . Ортогональны ли функции  $R_{20}(r)$  и  $R_{21}(r)$ ?
9. Пользуясь тем, что для  $\ell = n - 1$  функция  $w$  (9.16) есть константа,

построить нормированные волновые функции  $\psi_{n,\ell=n-1,m}(\theta, \phi)$  через выражения для сферических гармоник.

10. Для атома водорода в основном состоянии ( $1s$ ) построить графики  $dW/d^3r$  и  $dW/dr$  в зависимости от  $r$ . Найти  $\psi_{100}(p)$  и построить графики  $dW/d^3p$  и  $dW/dp$ . Найти  $\langle \mathbf{p} \rangle$ ,  $\langle p \rangle$  и  $\Delta p$ ,  $\langle r \rangle$  и  $\Delta r$ . Оценить напряжённость электрического поля на расстоянии  $r = a_B$  от ядра.
11. Для состояний  $2s$  и  $2p$  атома водорода построить графики  $dW/d^3r$  в зависимости от  $r$  и  $\theta$ . Найти среднее магнитное поле, создаваемое электроном в центре в состоянии  $2p$ . Сравнить это поле с характерным электрическим полем. Объяснить результат.
12. Найти средние значения кинетической и потенциальной энергии для различных состояний атома водорода.
13. Найти вероятность того, что при  $\beta$ -распаде трития электрон останется в основном состоянии иона  $He^+$ .
14. «Атом»  $\mu^- \pi^+$  состоит из мюона  $\mu^-$  и пиона  $\pi^+$  — частиц с массами  $106 \text{ МэВ}/c^2$  и  $140 \text{ МэВ}/c^2$  соответственно. Найти распределение электрического заряда относительно центра масс в основном состоянии этого атома. Найти соответствующее распределение для атома водорода. На каком расстоянии от протона эта плотность обращается в нуль, имеет минимум (предъявить числа).
15. Найти уровни энергии в системе с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} - \frac{e^2}{r} \left( 1 - \frac{a_M}{\gamma r} \right) \quad \left( a_M = \frac{\hbar^2}{Me^2} \equiv a_B \frac{m_e}{M} \right).$$

Проанализировать два предельных случая.

- а) В **атоме**, где  $M = m_e$ , отклонение от кулоновского потенциала моделирует влияние поляризуемости атомного остатка под действием валентного электрона на уровни ближайших к ядру электронов, при этом  $e^2 \rightarrow Ze^2$  и  $\gamma \gg 1$ . Рассматривая эту поправку как возмущение, сравнить точное решение с решением, использующим дифференцирование энергии по параметру (5.9).
- б) В **двухатомной молекуле**  $M$  — приведённая масса пары ядер, отклонение от кулоновского потенциала описывает отталкивание электронов разных ядер, при этом  $\gamma \ll 1$  — см. обсуждение на стр. 331.
16. Найти поправки к энергии атома водорода, обусловленные конечными размерами ядра.

17. а) 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  $\langle N|\mathbf{er}|N\rangle = \langle \mathbf{d} \rangle$  максимально? Найти величину  $\langle d \rangle$  при этом.
- б) Решить ту же задачу для  $n = 3$ .
18. Атом водорода помещён в однородное электрическое поле с потенциалом  $V = e\mathcal{E}z$  (возмущение). Какие матричные элементы возмущения по вырожденным состояниям с  $n = 3$  и  $n = 4$  отличны от нуля? На какие состояния расщепился уровень с  $n = 3$ , с  $n = 4$ ? Каковы кратности вырождения получившихся уровней?
19. Улучшить оценки (9.27), (9.28) для атома водорода в основном состоянии, включив в ответы точно вклады первых возбуждённых состояний.
20. 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. Специально рассмотреть случай  $\mu a_B \ll 1$ . Решить ту же задачу для  $n = 1$  вариационным методом, используя водородоподобные и осцилляторные пробные волновые функции. Сравнить результаты.

## Глава 10

### Спин

#### § 10.1. Основные факты

Квантовая частица может иметь внутренние степени свободы, отсутствующие у классических частиц.

*Пример.* У атомного ядра есть собственный орбитальный момент  $L$ . В классическом случае  $L = mvr$  стремится к нулю при  $r \rightarrow 0$ . В квантовой теории этот момент остаётся конечным и при исчезающе малых размерах ядра, поскольку единица квантования момента  $\hbar$  от размера ядра не зависит.

- В опытах Штерна и Герлаха нейтральные атомы пролетали через магнитное поле  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$  и оседали на охлаждаемой пластинке вдоль линии, определяемой разбросом начальных скоростей. При добавлении на пути неоднородного магнитного поля<sup>1</sup>  $B \rightarrow B(z)$  движение атомов искажается силой  $F = \mu_z \partial B_z / \partial z$ , где  $\boldsymbol{\mu}$  — вектор собственного магнитного момента электрона. Если бы движение описывалось законами классической механики, эта сила принимала бы любые значения в пределах  $\pm \mu \partial B_z / \partial z$ . В результате линия, где осаждаются пролетевшие атомы, должна была бы размываться. В соответствии с излагаемым ниже, в §11.1, квантованность значений  $\mu_z$  должна приводить 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  $\ell$  невозможно связать с обычным моментом импульса, обсуждавшимся в гл. 8.

- В нерелятивистской квантовой механике **постулируется**, что **частицы могут иметь внутреннюю степень свободы, похожую на момент импульса, но не связанную с пространственным**

<sup>1</sup>В силу уравнения  $\operatorname{div} \mathbf{B} = 0$ , неоднородность основного поля приводит к появлению небольших поперечных компонент поля, которые лишь слабо влияют на поведение магнитного момента атома — см. подробнее в §11.1.

движением, и называемую спином (В. Паули). Оператор спина — вектор  $\hat{S} \equiv \hbar \hat{s}$ . Согласно нашему постулату, перестановочные соотношения для компонент этого вектора такие же, как и для компонент оператора момента импульса (8.3), т. е.

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = ie_{ijk} \hat{s}_k; \quad [\hat{s}^2, \hat{s}_i] = 0. \quad (10.1)$$

**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. § 8.1). 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 (8.16) разрешено и  $s = 1/2$ . Результаты Штерна и Герлаха показывают, что именно такое значение реализуется для электрона. (В релятивистской квантовой теории обойтись без понятия спина, который может принимать либо целые, либо полуцелые значения, невозможно.)

В природе реализуются частицы с разными значениями спина:

- спин 0 —  $\alpha$ -частицы (ядра  ${}^4_2\text{He}$ ),  $\pi$ - и  $K$ -мезоны, бозон Хиггса;
- спин 1/2 — электроны, нейтрино, протоны, нейтроны, кварки,  ${}^3_2\text{He}$ ;
- спин 1 — фотоны,  $W$ - и  $Z$ -бозоны (переносчики слабых взаимодействий),  $\rho$ -мезоны, дейтоны (ядра  ${}^2_1\text{H}$ )<sup>1</sup>;
- спин 3/2 — ядра  ${}^7\text{Li}$ ,  ${}^9\text{Be}$ ,  ${}^{21}\text{Na}$ ;
- спин 2 — ядра  ${}^8\text{Li}$ , гравитоны (*пока не обнаружены*);
- существуют ядра и с более высокими значениями спина.

## § 10.2. 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 них фиксировано, мы не будем указывать эту величину в обозначении собственных векторов — собственные векторы  $|s = 1/2, s_z = \pm 1/2\rangle$  мы будем обозначать просто  $|\pm\rangle$ .

<sup>1</sup>Для частицы с нулевой массой покоя момент импульса и спин не разделяются. Спином называют наименьшее значение их суммы, для фотона оно составляет 1 (в единицах  $\hbar$ ) — см. приложение E.

Вектор состояния спинорной частицы можно представить в виде суперпозиции  $\chi = a_{+(z)}|+\rangle + a_{-(z)}|-\rangle$  состояний с проекциями спина на ось  $z$ , равными  $+1/2$  и  $-1/2$ , функции координат и времени  $a_{\pm(z)}$  связаны соотношением нормировки  $\int d\mathbf{x} (|a_{+(z)}(\mathbf{x}, t)|^2 + |a_{-(z)}(\mathbf{x}, t)|^2) = 1$ . Это состояние записывают в виде столбца (его называют *спинором*), а сопряжённый вектор состояния — в виде строки так, что

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \chi = \begin{pmatrix} a_{+(z)} \\ a_{-(z)} \end{pmatrix}, \quad \chi^\dagger = (a_{+(z)}^*, a_{-(z)}^*). \quad (10.2)$$

Значок  $(z)$  напоминает о том, что рассматриваются проекции на ось  $z$ . Если записать тот же вектор через состояния, отвечающие проекциям на ось  $x$ , то он, разумеется, имеет такую же форму (10.2), но с другими коэффициентами  $a_{+(x)}$  и  $a_{-(x)}$ . Для сокращения записи и имея в виду стандартный выбор, мы опускаем ниже значок  $(z)$ .

◇ На языке теории групп состояния спина 1/2 реализуют *фундаментальное представление* группы вращений, а состояния с моментом 1 — *присоединённое представление*.

◇ Набор матричных элементов  $\langle sm|\hat{s}_i|sm'\rangle$ , который получается из (8.18) и из определения  $\hat{s}_z$ , удобно представить в виде матриц, подобных (8.24), которые называют **матрицами Паули**:

$$\hat{s}_i \equiv \hat{\sigma}_i/2: \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (10.3)$$

Легко проверить, что выполняются соотношения

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = I \cdot \delta_{ij} + ie_{ijk} \hat{\sigma}_k, \quad \hat{\sigma}_i^2 = I, \quad \text{Tr } I = 2, \quad \text{Tr } \hat{\sigma}_i = 0. \quad (10.4)$$

◇ Нетрудно проверить, что для состояния (10.2) среднее значение спина есть вектор

$$\langle \mathbf{s} \rangle = (1/2) (2\text{Re}(a_+ a_-^*), 2\text{Im}(a_+ a_-^*), |a_+|^2 - |a_-|^2) \quad (10.5)$$

и, стало быть, ось  $z'$ , для которой  $\hat{s}_{z'}\chi = (1/2)\chi$  имеет сферические координаты  $\theta = 2 \arctg |a_-/a_+|$ ,  $\phi = \arg(a_-/a_+)$  — см. задачу 10.6. В частности, векторы состояний  $|\chi_{x\pm}\rangle$ , в которых проекции спина на ось  $x$  равны  $+1/2$  и  $-1/2$ , и состояний  $|\chi_{y\pm}\rangle$ , в которых проекции спина на ось  $y$  равны  $\pm 1/2$  в используемом базисе имеют вид

$$|\chi_{x\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}, \quad |\chi_{y\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mp i \end{pmatrix}. \quad (10.6)$$

▽ Нередко обсуждаются пучки неполяризованных электронов со средним значением спина  $\langle \mathbf{s} \rangle = 0$ . На первый взгляд, это противоречит (10.5). Противоречие снимается при изучении спиноров, меняющихся со временем и дальнейшем усреднении по времени. В силу (10.5), для получения  $\langle s_z \rangle = 0$  необходимо, чтобы было  $|a_-| = |a_+| (= 1/\sqrt{2})$ , т. е. можно записать  $a_- = a_+ e^{i\alpha}$ . При этом  $2\langle s_x \rangle = \cos \alpha$ ,  $\langle s_y \rangle = \sin \alpha$ . Эти последние средние обращаются в ноль при усреднении по времени, если  $\alpha$  — случайная функция времени.

◇ Если  $\mathbf{n}$  — единичный вектор, то скалярное произведение  $(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})/2$  представляет собой оператор проекции спина на ось  $\mathbf{n}$ . Поэтому, в частности,  $(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})^2 = 1$ . Такое понимание величины  $(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})$  легко позволяет получить также, что для любой функции  $f(x)$  имеет место тождество

$$f(a(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})) \equiv \frac{f(a) + f(-a)}{2} + (\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n}) \frac{f(a) - f(-a)}{2}. \quad (10.7)$$

Это соотношение легко получить также, рассматривая функцию от оператора как её разложение в ряд Маклорена (1.6) и применяя многократно первое равенство (10.4).

$$\text{Операторы} \quad \hat{\mathcal{P}}_{\pm} = (1 \pm \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})/2, \quad (10.8)$$

являются проекционными, поскольку  $\hat{\mathcal{P}}_{\pm}^2 = \hat{\mathcal{P}}_{\pm}$ . Они выбирают из волновой функции компоненты, в которых проекция спина на ось  $\mathbf{n}$  равна  $+1/2$  или  $-1/2$  соответственно (ср. с общим определением (8.19)).

◇ Нередко спиновое и пространственное движения разделяются. При этом, вводя обобщённые координаты  $q \equiv (r_i, s_z)$ , можно записать

$$\psi(q) = \psi(\mathbf{r}) \cdot \chi(s_z). \quad (10.9)$$

### Преобразование спиноров при вращении координат

Оператор поворота осей координат на конечный угол  $\alpha$  относительно оси  $\mathbf{n}$  для произвольного значения момента импульса имеет вид  $\hat{U}_n(\alpha) = e^{i\alpha(\mathbf{n}\hat{\mathbf{L}})/\hbar}$  (8.4). Для преобразования спиноров с учётом (10.7) это соотношение принимает вид

$$\hat{U}_n(\alpha) = e^{i(\mathbf{n}\boldsymbol{\sigma})\alpha/2} \equiv \cos \frac{\alpha}{2} + i(\mathbf{n}\boldsymbol{\sigma}) \sin \frac{\alpha}{2}. \quad (10.10a)$$

В частности, при повороте на угол  $2\pi$  вокруг любой оси компоненты спинора меняют знак.

Из (10.10a) легко получаются и явные выражения для операторов конечных вращений вокруг различных осей в случае, когда спиноры определены в базисе проекций на ось  $z$ :

$$\begin{aligned}\hat{U}_z(\alpha) &= \begin{pmatrix} e^{i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix} \equiv \cos(\alpha/2) + i\sigma_z \sin(\alpha/2), \\ \hat{U}_x(\alpha) &= \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) & i \sin(\alpha/2) \\ i \sin(\alpha/2) & \cos(\alpha/2) \end{pmatrix} \equiv \cos(\alpha/2) + i\sigma_x \sin(\alpha/2), \quad (10.10b) \\ \hat{U}_y(\alpha) &= \begin{pmatrix} \cos(\alpha/2) & \sin(\alpha/2) \\ -\sin(\alpha/2) & \cos(\alpha/2) \end{pmatrix} \equiv \cos(\alpha/2) + i\sigma_y \sin(\alpha/2).\end{aligned}$$

С помощью этих выражений можно найти, например, выражения для собственных функций операторов проекций спина на оси  $x$  и  $y$  в базисе (10.3).

В частности, изменение вида спинора  $\chi_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  при повороте оси  $z$  на угол  $\theta$  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  $z$  даётся естественным выражением

$$\langle s_{z'} \rangle = (1/2)\chi'^{\dagger}\sigma_z\chi' = (1/2)(\cos^2(\theta/2) - \sin^2(\theta/2)) = (1/2)\cos\theta.$$

В соответствии с общими правилами (1.23) изменение формы спинорного оператора, например, при повороте оси  $z$  на угол  $\theta$  в плоскости  $xz$  описывается соотношением  $\hat{F} \rightarrow \hat{U}_y^{-1}(\theta)\hat{F}\hat{U}_y(\theta)$ . В частности, например, при таком повороте  $\sigma_x \rightarrow \sigma_x \cos\alpha - \sigma_z \sin\alpha$ .

Решения задач 10.2–11 являются необходимой составной частью излагаемой темы.

### § 10.3. 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  $2 \times 2$  матрицу  $A$  можно представить в виде

$$A = a \cdot I + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}; \quad a = \frac{\text{Tr } A}{2}, \quad \mathbf{b} = \frac{\text{Tr}(A\boldsymbol{\sigma})}{2}. \quad (10.11)$$

*Пример.* Рассмотрим изменение уровней системы с двумя вырожденными или близко расположенными уровнями  $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_2$  под действием возмущения  $\hat{V}$  с матричными элементами по этим состояниям  $V_{ij}$  ( $i, j = 1, 2$ ) (разд. 5.5). 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 (10.11),  $\|\varepsilon + \mathcal{V}\| = a \cdot I + \sum_i b_i \cdot \sigma_i$ . Уровни энергии — собственные значения этой матрицы. Унитарное преобразование, диагонализующее эту матрицу, приводит её к форме  $a \cdot I + b \cdot \sigma_3$  с собственными значениями  $a \pm b$ . Это преобразование отвечает вращению вектора  $\mathbf{b}$ , при этом  $b = \sqrt{b_1^2 + b_2^2 + b_3^2}$  (ср. задачу 10.12).

## § 10.4. 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. Показать, что представление (10.9) не работает при объяснении опыта Штерна–Герлаха.
2. Найти квадраты проекций электронного спина на оси  $x, y, z$ .
3. Найти собственные функции и собственные значения операторов  $\hat{s}_x$  и  $\hat{s}_y$  в базисе (10.3).
4. 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  $s_y|\chi_y\rangle = \pm|\chi_y\rangle/2$ .
5. Найти собственные векторы проекционных операторов (10.8).
6. Пусть  $\chi = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ e^{i\beta} \sin \alpha \end{pmatrix}$ . Куда направлена ось  $z'$ , для которой  $\hat{s}_{z'}\chi = (1/2)\chi$ ?
7. Пусть  $\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d}$  — спинорные векторы, т. е. тройки  $2 \times 2$  матриц с равным нулю следом и таких, что, например,  $c_i^T c_i = 1$ . Докажите, что имеет место правило Фирца  $(\mathbf{ab})(\mathbf{cd}) = (\mathbf{ac})(\mathbf{bd}) - (\mathbf{ad})(\mathbf{cb})$ .
8. Найти  $(\sigma\mathbf{a})(\sigma\mathbf{b})$ ;  $(\sigma\mathbf{a})^n$ ;  $e^{i(\sigma\mathbf{n})\alpha}$  (ср. (10.7)).
9. Покажите, что величина  $(\chi_1^\dagger \chi_2) \equiv a_1^* a_2 + b_1^* b_2$  не изменяется при вращении осей координат (10.10), т. е. является скаляром.
10. Найти преобразование каждой из матриц Паули при вращении системы координат (10.10) на угол  $\theta$  относительно осей  $x, y$  и  $z$ .

11. В общем случае получить преобразование матриц Паули  $\sigma_k$  при вращении системы координат (10.10), т. е. вычислить  $\hat{U}^{-1}\sigma_k\hat{U}$ .
12. Найти собственные значения операторов  $a + b\mathbf{n}\sigma$ ,  $f(a + b\mathbf{n}\sigma)$ .
13. 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,  $E = 0$ .
14. Гамильтониан взаимодействия двух частиц со спином  $1/2$  имеет вид  $\hat{H} = g(\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2)$ , где  $g$  — константа. В момент времени  $t = 0$  первая частица поляризована вдоль оси  $z$ , а вторая — вдоль оси  $x$ . Найти средние значения компонент спина первой частицы  $s_1$  в ненулевой момент времени.

## Глава 11

### Движение в магнитном поле

В последующем описании важную роль играют параметры, характеризующие классические явления в однородном поле  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ , где движение электрона складывается из свободного движения вдоль оси  $z$  и вращения с *циклотронной* (ларморовской) частотой  $\omega_B$  в плоскости  $(x, y)$  по окружности с радиусом  $\rho_B$  (*ларморовский радиус*):

$$\omega_B = |e|B/mc, \quad \rho_B = v_{\perp}/\omega_B \equiv p_{\perp}c/(eB) \equiv \sqrt{2mE_{\perp}}/\omega_B. \quad (11.1)$$

(Значок  $\perp$  отмечает компоненты, перпендикулярные полю.)

Радиус  $\rho_B$  следует сравнивать с характерным масштабом  $\bar{a}$  движения частицы в отсутствие поля, «радиусом орбиты». Для атомной системе оценка в духе теоремы о вириале показывает (с точностью до коэффициентов порядка 2 и до знака), что средняя потенциальная энергия и средняя кинетическая энергия (характерная энергия локализации частицы в области размер  $\bar{a}$ ) — того же порядка, что и полная энергия состояния  $E_n$ . Для грубой оценки мы принимаем<sup>1</sup>

$$|E_n| \sim \bar{p}^2/(2m) \sim \hbar^2/(2m\bar{a}^2) \quad (\bar{p} \sim \hbar/\bar{a}). \quad (11.2)$$

(Мы ввели здесь и характерный импульс  $\bar{p}$ .)

#### § 11.1. Магнитный момент частицы

**В классической теории** магнитный дипольный момент атома (далее — *магнитный момент*) обусловлен движением электронов

$$\mathcal{M} = \sum_a e_a \frac{\mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a}{2c} = \frac{e}{2mc} \cdot \mathbf{L},$$

<sup>1</sup>Эта оценка справедлива и для состояний атома водорода с небольшими  $n$ , для которых  $\bar{a} \sim a_B n^2$ , см. примечание на стр. 222.

где  $L$  — момент импульса системы электронов. Величину  $e/2mc$  называют *гиромагнитным отношением*. Взаимодействие нейтрального атома с магнитным полем  $\mathbf{B}$  описывается добавкой  $V = -(\mathcal{M}\mathbf{B})$  к энергии (функции Гамильтона). В неоднородном магнитном поле на такой атом действует сила, равная  $-\nabla V$ .

**В квантовой механике**, по принципу соответствия, гамильтониан взаимодействия заряженной частицы с магнитным полем должен иметь вид (ниже мы *получим* это выражение и оценим область его применимости):

$$\hat{H}_M = -(\hat{\mathcal{M}}\mathbf{B}), \quad (11.3)$$

где для частицы без спина магнитный момент есть

$$\mathcal{M} = \frac{e}{2mc} \hat{L} \equiv -\mu_B \hat{\ell} \quad \text{и} \quad \mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc}. \quad (11.4)$$

Здесь учтено, что  $\hat{L} = \hbar \hat{\ell}$  и введена величина  $\mu_B$ , которую называют<sup>1</sup> *магнетоном Бора*. В соответствии с этим проекция магнитного момента частицы на ось  $z$ ,  $\mu_z = \mu_B \ell_z$ , принимает дискретный ряд значений  $-\mu_B \ell, -\mu_B(\ell - 1), \dots, \mu_B \ell$ .

Наличие спина приводит к существованию дополнительного (спинового) магнитного момента  $\hat{\mathcal{M}}_s = g_a \mu_B^a \hat{s}$ . Здесь  $\mu_B^a \equiv e\hbar/2m_a c$  — магнетон Бора для частицы<sup>2</sup>  $a$ , а коэффициент  $g_a$  — величина порядка 1, различная для частиц разного сорта. Таким образом, полный оператор магнитного момента принимает вид

$$\hat{\mathcal{M}} = \mu_B (\hat{\ell} + g \hat{s}). \quad (11.5)$$

Спиновая степень свободы не имеет классического аналога. Поэтому в рамках квантовой механики никаких ограничений на число  $g_a$  нет, и в нерелятивистском описании это число берется из опыта. Оно определяется в релятивистской квантовой теории с учётом всех взаимодействий, в которых может принимать участие данная частица. Для точечных заряженных частиц со спином  $1/2$  должно быть  $g_a = 2$ , а для точечных нейтральных частиц  $g_a = 0$ . Отклонение от этих значений сигнализирует о наличии внутренней структуры частицы, величину

<sup>1</sup>Некоторые авторы называют магнетоном величину  $e\hbar/(2mc)$ , которая для электрона отрицательна.

<sup>2</sup>Например,  $a = e$  — электрон,  $a = p$  — протон,  $a = n$  — нейтрон, ...

этого отклонения принято называть аномальным магнитным моментом частицы. Вычисление аномального магнитного момента электрона  $e$  было важнейшим шагом на пути построения современной теории элементарных частиц. Оказалось, что в первом приближении по постоянной тонкой структуре  $\alpha = e^2/(\hbar c) = 1/137$  аномальный магнитный момент  $g_e/2 - 1 = \alpha/(2\pi)$ . Учёт последующих поправок лишь немного меняет этот ответ. Для протона  $p$  и нейтрона  $n$  эффекты внутренней структуры велики так, что<sup>1</sup>:

$$g_e/2 = 1,001159625, \quad g_p/2 = 2,79, \quad g_n/2 = -1,91. \quad (11.6)$$

Обратите внимание на сравнительно большой спиновый магнитный момент нейтральной частицы — нейтрона и на приближённое равенство  $g_p + g_n \approx 1$ .

Далее, говоря об электроне, мы всегда будем говорить просто о магнетоне Бора (не напоминая эпитет «электронный») и почти всегда будем считать  $g_e = 2$ .

## § 11.2. Уравнение Шредингера — уравнение Паули

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  $\mathbf{B} = [\nabla \times \mathbf{A}]$ ,  $\mathcal{E} = -(1/c)\partial\mathbf{A}/\partial t - \nabla\varphi$ . Поэтому классическая функция Гамильтона для движения в электромагнитном поле имеет вид  $H = (\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c)^2/2m + e\varphi(r)$ , а уравнение Шредингера с учётом спинового магнитного момента принимает вид (получено в 1927 г. В. Паули):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_\alpha(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \psi_\alpha(\mathbf{r}, t), \quad \hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)^2}{2m} + e\varphi(r) - g\mu_B(\hat{\mathbf{s}} \mathbf{B}). \quad (11.7)$$

Напомним, что входящая сюда волновая функция это спинор

$$\psi_\alpha = \begin{pmatrix} \psi_+(\mathbf{x}) \\ \psi_-(\mathbf{x}) \end{pmatrix},$$

<sup>1</sup> Дело в том, что электрон участвует лишь в электромагнитном взаимодействии, интенсивность которого определяется константой  $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137 \ll 1$ , а протоны и нейтроны участвуют ещё и в сильном (ядерном) взаимодействии, для которого соответствующая константа  $g^2/\hbar c \gtrsim 1$ .

т. е. наше уравнение представляет собой систему двух уравнений для двух компонент волновой функции.

Воспользовавшись уравнениями движения для операторов (гл. 3), можно проверить, что из гамильтониана (11.7) получаются классические по форме выражения для скорости частицы и её ускорения

$$\hat{v} = \frac{1}{m} \left( \hat{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right), \quad m \frac{d\hat{v}}{dt} = e \left( \frac{[\hat{v} \times \mathbf{B}]}{c} + \mathcal{E} \right) + g\mu_B \nabla(\hat{s} \cdot \mathbf{B}). \quad (11.8)$$

Получившиеся компоненты скорости не коммутируют друг с другом (см. (11.15)).

Выражение для плотности тока в присутствии магнитного поля модифицируется. Как и в отсутствие поля — см. разд. 2.1.2, для его получения вычисляют производную от плотности вещества по времени  $\partial\rho/\partial t = \psi^* \partial\psi/\partial t + (\partial\psi^*/\partial t)\psi$  и пользуются уравнением Шредингера для производных  $\partial\psi/\partial t$ . Это даёт нам дивергенцию тока, и отсюда восстанавливается сама плотность тока. Возникающее при этом выражение (*конвекционный ток*  $\mathbf{j}_k$ ) не включает явной зависимости от спина. Эта процедура оставляет свободу добавить в выражение для плотности тока ротор произвольной функции. Вид этой функции (*спиновая часть тока*  $\mathbf{j}_s$ ) фиксируется требованием, чтобы при изменении вектора–потенциала электромагнитного поля на малую величину  $\delta\mathbf{A}$  добавку к энергии системы можно было записать в виде (ср. [1, 21])  $\delta E = - \int (\mathbf{j} \cdot \delta\mathbf{A}) d^3\mathbf{x}$ . В итоге получается

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_k + \mathbf{j}_s, \quad (11.9)$$

$$\mathbf{j}_k = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^\dagger (\nabla\psi) - (\nabla\psi^\dagger)\psi] - \frac{e}{mc} \mathbf{A} \psi^* \psi, \quad \mathbf{j}_s = \frac{\mu_B c}{e s} [\nabla \times (\psi^\dagger \mathbf{s} \psi)].$$

Первое слагаемое конвекционного тока  $\mathbf{j}_k$  (в квадратных скобках) совпадает со стандартным выражением для тока в отсутствие магнитного поля (2.4). Простое интегрирование по частям показывает, что именно спиновая часть тока отвечает за добавку Паули (11.7) в гамильтониан.

### § 11.3. Калибровочная инвариантность

Из курса электродинамики известно, что вектор–потенциал определяется через измеримую величину — напряжённость поля только с точностью до градиента произвольной функции (*калибровочная*,

или *градиентная, инвариантность* уравнений электродинамики). Эта неоднозначность обобщает известную неоднозначность в определении энергии — с точностью до выбора начала отсчёта.

Переходя к квантовой механике, мы обнаруживаем, 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  $f(\mathbf{r}, t)$ :

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla f(\mathbf{r}, t), \quad \varphi(\mathbf{r}) \rightarrow \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad \psi \rightarrow \psi \cdot e^{(ief(\mathbf{r}, t)/\hbar c)}. \quad (11.10)$$

(В четырёхмерной записи  $A^\mu = (\varphi, \mathbf{A})$  преобразование поля (11.10) имеет вид  $A^\mu \rightarrow A^\mu - \partial f / \partial x_\mu$ .)

Такое преобразование называют *калибровочным*. Независимость наблюдаемых физических результатов теории от калибровочного преобразования (11.10) называют *калибровочной (gauge) инвариантностью* квантовой механики.

Ниже мы используем произвол в выборе калибровки для того, чтобы получать интересующие нас результаты самым удобным образом. Иногда в одной и той же физической задаче плодотворным оказывается использование разных калибровок для ответа на разные вопросы. Перечислим некоторые часто используемые калибровки с указанием их авторов:

$$\begin{array}{l} \boxed{\text{Лоренц: } \sum_{\mu} \partial A^\mu / \partial x^\mu = 0} \\ \quad (\mu = 0, 1, 2, 3) \end{array} ; \quad \boxed{\text{Фок-Швингер} : \sum_{\mu} x^\mu A_\mu = 0} ;$$

$$\boxed{\text{Кулон: } \sum_i \partial A^i / \partial x^i = 0} ; \quad \boxed{\text{Гамильтон (Вейль)} : A_0 = 0 (\phi = 0)} ; \quad (11.11)$$

$$\boxed{\text{аксиальная: } A_3 = 0} .$$

Такие условия оставляют ещё произвол в выборе деталей калибровки. В частности, для однородного магнитного поля  $\mathcal{B}$ , направленного по оси  $z$ , мы используем ниже разные модификации кулоновской калибровки:

$$(a) \mathbf{A} = (0, \mathcal{B}x, 0); \quad (b) \mathbf{A} = (-\mathcal{B}y, 0, 0); \quad (c) \mathbf{A} = (-\mathcal{B}y/2, \mathcal{B}x/2, 0).$$

При переходе от калибровки (а) к калибровке (б) калибровочная функция  $f = -\mathcal{B}xy$ , т. е. в соответствии с (11.10) при этом переходе все волновые функции следует домножить на  $e^{-ie\mathcal{B}xy/(\hbar c)}$ .

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  $\alpha(\mathbf{r}) = ef(\mathbf{r})$ ) 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 должны были бы догадаться, что такое компенсирующее поле должно существовать 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 (единая теория электромагнитных и слабых взаимодействий и теория ядерных сил — квантовая хромодинамика). В теории электрослабых взаимодействий частицами компенсирующих — *калибровочных* — полей являются фотон и его аналоги —  $W$ - и  $Z$ -бозоны со спином 1 и с массами в 85–100 раз больше массы протона. В квантовой хромодинамике частицы калибровочного поля называются глюонами, в отличие от фотонов, глюоны взаимодействуют друг с другом, оказывается, что глюоны не могут улетать далеко от своих источников.

## § 11.4. Движение в магнитном поле

В этом параграфе мы рассмотрим движение частицы во внешнем однородном магнитном поле  $\mathcal{B}$  (естественно считать, что на атомных расстояниях изменение внешнего поля пренебрежимо мало). Для разных задач мы будем использовать различные варианты кулоновской калибровки вектора–потенциала.

Для решения многих задач удобно выбрать вектор–потенциал в

виде  $\mathbf{A} = -[\mathbf{r} \times \mathbf{B}]/2$ . Тогда, раскрывая скобки, запишем

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + e\varphi(\mathbf{r}) - g\mu_B \mathbf{s}\mathbf{B} + \frac{e}{2mc} \mathbf{p}[\mathbf{r} \times \mathbf{B}] + \frac{e^2[\mathbf{r} \times \mathbf{B}]^2}{8mc^2}.$$

Учитывая, что  $[\mathbf{r} \times \mathbf{p}] = \mathbf{L} \equiv \hbar \boldsymbol{\ell}$ , получаем отсюда (ср. (11.4))

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{H}_M + \hat{H}_2, \\ \hat{H}_0 &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + e\varphi(\mathbf{r}), \quad \hat{H}_M = -\mu_B(\hat{\boldsymbol{\ell}} + g\hat{\mathbf{s}})\mathbf{B}, \quad \hat{H}_2 = \frac{e^2[\mathbf{r} \times \mathbf{B}]^2}{8mc^2}. \end{aligned} \quad (11.12)$$

Слагаемое  $\hat{H}_M$  в точности соответствует введённому ранее из классических соображений (принцип соответствия) гамильтониану (11.3) с магнитным моментом  $\mathcal{M}$  (11.5).

#### 11.4.1. Переход к магнитному моменту

В случае  $\bar{a} \ll \rho_B$  (когда внутренние силы искривляют движение сильнее, чем магнитные, см. определения (11.1), (11.2)) слагаемым  $\hat{H}_2$  можно пренебречь. Чтобы убедиться в этом, используем для  $|E_n\rangle$  оценку (11.2). Прямые оценки из определений дают  $\langle H_2 \rangle \sim (e\mathcal{B})^2 a^2 / (8mc^2)$  и  $\langle |H_M| \rangle \sim e\mathcal{B}\hbar / (2mc)$  (при  $\ell = 1$  и  $s \leq 1$ ). Подставляя сюда значение  $e\mathcal{B}$  из определения (11.1), найдём

$$\begin{aligned} \langle H_2 \rangle &\sim \frac{\hbar^2 \bar{a}^2 \bar{p}^2}{8m\rho_B^2} \sim |E_n| \left( \frac{\bar{a}}{2\rho_B} \right)^2, \\ \langle H_M \rangle &\sim \frac{\hbar \bar{p}}{2m\rho_B} \sim \frac{\hbar^2 \bar{a}}{2m\bar{a}^2 \rho_B} \sim |E_n| \frac{\bar{a}}{\rho_B}. \end{aligned} \quad (11.13)$$

Итак, линейное по полю слагаемое  $\hat{H}_M$  даёт малую поправку порядка  $\bar{a}/\rho_B$  к энергиям уровней основного взаимодействия, формирующего атомные уровни энергии, а вклад слагаемого  $\hat{H}_2$  имеет такую же малость  $\bar{a}/\rho_B$  по отношению к расщеплению этих уровней, возникающему из-за слагаемого  $\hat{H}_M$ .

Учёт только слагаемого  $\hat{H}_M$  при описании состояний в магнитном поле составляет содержание приближения магнитного момента, используемого в разд. 15.1.7 при описании расщепления уровней в магнитном поле.

∇ При увеличении магнитного поля использование понятия магнитного момента без учёта квадратичного по полю слагаемого в гамильтониане может привести к ошибкам.

### 11.4.2. Электрон в однородном магнитном поле. I

В случае  $\rho_B \ll \bar{a}$  искривление траектории, вызываемое магнитными силами, превышает искривление, обусловленное внутренними силами. Это — движение свободного электрона в однородном магнитном поле (без электрического поля). При его описании отбрасывание слагаемого  $\hat{H}_2$  (11.12) недопустимо. Основные характеристики соответствующего классического движения приведены в (11.1).

В этом разделе мы получаем результаты калибровочно инвариантным методом.

Наряду с операторами компонент скорости (11.8) введём по аналогии с классической картиной операторы координат центра окружности и квадрата её радиуса

$$\hat{x}_c = \hat{x} + \hat{v}_y/\omega_B, \quad \hat{y}_c = \hat{y} - \hat{v}_x/\omega_B, \quad \hat{\rho}^2 = (x - \hat{x}_c)^2 + (y - \hat{y}_c)^2 \equiv \frac{\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2}{\omega_B^2}.$$

- Полезно переписать наш гамильтониан (11.7) в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_\perp + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} - g\mu_B \hat{s}, \quad \hat{H}_\perp = \frac{m}{2} (\hat{v}_x^2 + \hat{v}_y^2) \equiv \frac{m\omega_B^2}{2} \hat{\rho}^2. \quad (11.14)$$

Оператор  $\hat{p}_z$  коммутирует с гамильтонианом. Поэтому компонента импульса, направленная вдоль поля, сохраняется, движение электрона в этом направлении свободное, как и в классическом случае. Далее мы рассмотрим уровни энергии поперечного движения, определяемого гамильтонианом  $\hat{H}_\perp$ .

Прямое вычисление показывает, что в однородном магнитном поле операторы координат центра окружности и компонент скорости по отдельности сохраняются, т. е. например  $[\hat{x}_c, \hat{H}] = 0$ ,  $[\hat{v}_y, \hat{H}] = 0$ . В то же время они не коммутируют друг с другом, так же, как и компоненты вектора скорости

$$[\hat{v}_y, \hat{v}_x] = -\frac{i\hbar e}{m^2 c} \mathcal{B} \equiv -\frac{i\hbar\omega_B}{m}, \quad [\hat{x}_c, \hat{y}_c] = -\frac{2i\hbar}{m\omega_B} \equiv -\frac{2i\hbar c}{e\mathcal{B}}. \quad (11.15)$$

Это означает (см. § 2.2), что состояния поперечного движения вырождены. На классическом языке это — вырождение по положениям центра окружности.

Заменяем теперь операторы компонент скорости на новые операторы  $\hat{G}_i$ , определяемые соотношением  $\hat{v}_i = a_i \hat{G}_i$ , и выберем коэффициенты так, что  $a_x a_y = \omega_B / m$ . После этого перестановочные соотношения между компонентами скорости (11.15) приобретают тот же вид, что и соотношения между импульсом и координатой для одномерного движения. Выбрав  $a_y = 1/m$ ,  $a_x = \omega_B$ , мы получаем новое выражение для нашего гамильтониана (11.14):

$$\begin{aligned} \hat{G}_y = m\hat{v}_y, \quad \hat{G}_x = \hat{v}_x/\omega_B, \Rightarrow [\hat{G}_y, \hat{G}_x] = -i\hbar; \\ \hat{H}_\perp = \frac{\hat{G}_y^2}{2m} + \frac{m\omega_B^2 \hat{G}_x^2}{2}. \end{aligned} \quad (11.16)$$

Это — гамильтониан гармонического осциллятора с частотой  $\omega_B$ , гл. 4, в котором  $\hat{G}_y$  играет роль импульса, а  $\hat{G}_x$  — роль координаты. Здесь можно полностью воспроизвести операторный метод получения уровней системы § 4.1 и получить, что энергии уровней определяются известной формулой  $E_{n\perp} = \hbar\omega_B (n + 1/2)$ . Вспоминая ещё спиновое слабое и движение вдоль поля, запишем полную энергию электрона в магнитном поле (уровни Ландау)

$$E = \hbar\omega_B \left( n + \frac{1}{2} + \sigma_z \right) + \frac{p_z^2}{2m} \quad (\sigma_z = \pm 1). \quad (11.17)$$

Полученный ответ описывает движение электронов с разными центрами траекторий (движение вырождено по положению этого центра). Результат не зависит от выбора выражения для векторного потенциала, т. е. он *калибровочно инвариантен*.

В то же время наши «координаты и импульсы» — операторы  $\hat{v}_i/a_i$  выражаются через векторный потенциал. Поэтому полученное решение не даёт однозначного выражения волновой функции в зависимости от координат, последнее *зависит от калибровки*. Это — плата за использование калибровочно инвариантного подхода.

**Максимальная энергия.** Используя второе выражение для гамильтониана (11.14), мы обнаруживаем, что для состояния с энергией  $E_{n\perp}$  среднее значение квадрата радиуса орбиты совпадает со значением классического радиуса орбиты для электрона (11.1):

$$\langle \rho^2 \rangle = \frac{\hbar(2n+1)}{m\omega_B} \equiv (2n+1) \frac{\hbar c}{e\mathcal{B}}. \quad (11.18)$$

Ясно, что наше решение может описывать реальность только до тех пор пока радиус орбиты не выходит за пределы области однородности магнитного поля, площадь которой мы обозначим через<sup>1</sup>  $S$ , т. е.  $\pi\langle\rho^2\rangle < S$ . Это неравенство даёт максимальное число «магнитных квантов»  $n_{max}$  и максимальное значение энергии уровней Ландау  $E_{\perp max}$ :

$$n < n_{max} = \Phi/\Phi_0 \Rightarrow E_{\perp max} = \hbar\omega_B(n_{max} + 1/2), \quad (11.19)$$

здесь  $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/e = 4,14 \cdot 10^{-7} \text{ Гс} \cdot \text{см}^2 \equiv 4,14 \cdot 10^{-15} \text{ Вб}$ .

Подстановка чисел показывает, что максимальную энергию электрона можно записать ещё и в виде  $E_{\perp max} = Sr_e \cdot \mathcal{B}^2/(2\pi)$ , где  $r_e = e^2/(mc^2)$  — «классический радиус электрона». Иными словами эта энергия равна энергии магнитного поля в объёме с площадью основания  $S$  и высотой  $4r_e$ .

Появившаяся в (11.19) величина  $\Phi_0/2$  имеет смысл кванта магнитного потока для электрона<sup>2</sup>.

• **Кратность вырождения.** Помимо тривиального вырождения по продольному импульсу электрона, полученные состояния (11.22a) бесконечнократно вырождены по положениям центра орбиты электрона. *Кратность вырождения становится конечной для движения, ограниченного конечной площадью  $S = XY$ .* Чтобы найти эту кратность, вспомним перестановочное соотношение для координат центра окружности (11.15). После замены переменных  $\hat{x}_c = (2c/e\mathcal{B})\hat{g}$  это соотношение принимает вид  $[\hat{g}, \hat{y}_c] = -i\hbar$  — такой же, как и между координатой и импульсом. При нашем условии (11.19) можно использовать квазиклассическую оценку числа возможных состояний (6.11) в виде  $N_E = \Delta g \Delta y_c / (2\pi\hbar) \equiv \Delta x_c (e\mathcal{B}/(2c)) \Delta y_c / (2\pi\hbar)$  с естественным условием  $\Delta x_c \Delta y_c = XY$  (все центры помещаются внутри области однородности магнитного поля  $S = XY$ ). В итоге при заданном  $p_z$  кратность вырождения (число возможных состояний) выражается через магнитный поток  $\Phi = \mathcal{B}S$ :

$$N_E = e\mathcal{B}S/(2\pi\hbar c) \equiv \Phi/(2\Phi_0). \quad (11.20)$$

<sup>1</sup>При оценке удобно считать эту область круглой.

<sup>2</sup>Магнитный поток, проходящий через поверхность, ограниченную замкнутым сверхпроводящим контуром, может принимать только дискретные значения. Квантом этого потока для обычных сверхпроводников является величина  $\Phi_0/2$ , ибо носителями тока в сверхпроводниках являются не отдельные электроны, а их пары с противоположно направленными квазиимпульсами и спинами (куперовские пары).

Таким образом, кратность вырождения по порядку величины совпадает с максимальной энергией уровня Ландау в единицах  $\hbar\omega_B$ . С другой стороны, для классического электрона с энергией  $\hbar\omega_B$  радиус орбиты  $a_M = \sqrt{\hbar/m\omega_B}$ , и квант магнитного потока есть магнитный поток через круг радиуса  $a_M$ : величина  $\Phi_0/2 = \pi\mathcal{B}a_M^2$ . Кратность вырождения совпадает с числом неперекрывающихся «магнитных кружков» с энергией  $\hbar\omega_B$ , которые помещаются на площади  $S$ .

**Суперсимметрия.** Помимо изученного вырождения, не зависящего от существования спина, в системе наблюдается ещё одно вырождение. Энергия (11.17) зависит только от суммы  $n + \sigma_z$ , а не от величин  $n$  и  $\sigma_z$  по отдельности. Это дополнительное вырождение отвечает специальной симметрии, перепутывающей спинорные и пространственные степени свободы. Её называют суперсимметрией. В квантовой механике эту симметрию можно рассматривать как любопытное численное наблюдение. При переходе к миру элементарных частиц по мнению значительного числа исследователей на очень малых расстояниях мир должен становится суперсимметричным, что обеспечит более эффективную универсализацию частиц и взаимодействий. В настоящее время на коллайдере ЛНС ведутся интенсивные поиски признаков суперсимметрии. Рассказывая об этом для полноты, автор считает возможность такого открытия маловероятной.

### 11.4.3. Электрон в однородном магнитном поле. II

Обсудим это же движение более традиционным методом, решая уравнение Шредингера в удобной калибровке. Этот метод удобнее для некоторых «соседних» задач.

Описание нашей физической системы, очевидно, не должно меняться при вращении вокруг оси  $z$ , соответственно здесь сохраняется проекция момента импульса электрона на эту ось. Кажется естественным сохранять эту симметрию на всех этапах решения, соответствующим образом выбирая калибровку векторного потенциала. Однако технически удобнее другой путь, использующий калибровку потенциала, которая явно нарушает указанную симметрию. Разумеется, эта симметрия восстанавливается в пространстве получившихся решений.

- Избрав для векторного потенциала форму  $\mathbf{A} = (0, x\mathcal{B}, 0)$ , запи-

шем уравнение Шредингера

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{(\hat{p}_y - e\mathcal{B}x/c)^2}{2m} + \mu_B \sigma_z \mathcal{B}. \quad (11.21a)$$

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  $\psi$  в виде  $\exp[i(y p_y + z p_z)/\hbar] \varphi(x) \chi(s_z)$ . Тогда в гамильтониане уравнения Шредингера для функции  $\varphi(x)$  операторы  $\hat{p}_z$ ,  $\hat{p}_y$  и  $s_z$  заменяются на числа  $p_z$ ,  $p_y$  и  $\sigma_z/2 = +1/2$  и  $-1/2$ . Обозначая ещё  $a_{B,y} = c p_y / (e\mathcal{B})$ , мы преобразуем это уравнение к виду

$$\frac{\hat{p}_x^2}{2m} \varphi(x) + \frac{m\omega_B^2 (x - a_{B,y})^2}{2} \varphi(x) = (E - \mu_B \sigma_z \mathcal{B} - \frac{p_z^2}{2m}) \varphi(x). \quad (11.21b)$$

Это уравнение по форме совпадает с уравнением Шредингера для осциллятора с частотой  $\omega_B$  (и с положением минимума потенциала  $x = a_{B,y}$ ). Поэтому энергии уровней имеют вид (11.17) (не зависят от импульса  $p_y$ !), и волновые функции выражаются через решения задачи для осциллятора (4.25) в зависимости от  $x - a_{B,y}$

$$\psi_{B,y} = e^{i(p_y y + p_z z)/\hbar} \psi_n \left( \frac{x - c p_y / e\mathcal{B}}{x_{0B}} \right), \quad x_{0B} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_B}} \equiv \sqrt{\frac{\hbar c}{e\mathcal{B}}}. \quad (11.22a)$$

Значок  $y$  в индексе функции отмечает выбор калибровки вектор-потенциала.

• Приведённое решение можно повторить, выбрав векторный потенциал в другой калибровке  $\mathbf{A} = (-y\mathcal{B}, 0, 0)$ . Для получения ответа достаточно выполнить очевидные замены переменных. Уровни энергии, естественно, совпадают с (11.17), а волновые функции имеют похожий, но в сущности совсем другой вид

$$\psi_{B,x} = e^{i(p_x x + p_z z)/\hbar} \psi_n \left( \frac{y + c p_x / e\mathcal{B}}{x_{0B}} \right), \quad (11.22b)$$

◇ В найденных решениях не угадывается движение по окружности, которое казалось очевидным в классической задаче и в решениях предыдущего раздела. Более того, полученные в разных калибровках решения явным образом различаются, хотя и должны описывать одну и ту же реальность. Это видимое различие и несоответствие классике

разрешаются, если вспомнить, что, например, состояния (11.22a) бесконечнократно вырождены по  $p_y$ , состояния (11.22b) бесконечнократно вырождены по  $p_x$  даже при фиксированном продольном импульсе  $p_z$ . Они образуют подпространство полного Гильбертова пространства, отвечающего заданным значениям энергии (11.17) и  $p_z$ . Волновые функции (11.22a) и (11.22b) образуют разные базисы этого подпространства, каждая из этих функций допускает разложение по набору других функций, с точностью до универсального фазового множителя  $e^{-ieBxy/(\hbar c)}$  — ср. (11.10).

В приложении F.5 приведено решение задачи в калибровке, сохраняющей цилиндрическую симметрию.

#### 11.4.4. Движение в скрещенных электрическом и магнитном полях

Рассмотрим задачу о движении электрона в перпендикулярных однородных электрическом и магнитном полях при<sup>1</sup>  $\mathcal{E} < \mathcal{B}$ , выбрав оси так, что  $\mathcal{B} = (0, 0, \mathcal{B})$ ,  $\mathcal{E} = (\mathcal{E}, 0, 0)$ . В этой задаче удобной для нас является калибровка вектора–потенциала  $\mathbf{A} = (0, x\mathcal{B}, 0)$ , в которой гамильтониан (11.21) дополняется одним слагаемым:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{(\hat{p}_y - ex\mathcal{B}/c)^2}{2m} - e\mathcal{E}x + \mu_B\sigma_z\mathcal{B}. \quad (11.23)$$

Как и в предыдущем решении, величины  $p_z$ ,  $p_y$  и  $\sigma_z$  сохраняются, и мы ищем решения, которые являются собственными состояниями этих операторов и энергии одновременно.

• Представим движение электрона как сумму классического движения со скоростью  $\mathbf{u}$  (импульсом  $m\mathbf{u}$ ) и квантового движения, импульс которого обычным образом выражается с помощью оператора  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ . Тогда в (11.23)

$$\frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}/c)^2 \Rightarrow \frac{1}{2m} (\hat{\mathbf{p}} + m\mathbf{u} - e\mathbf{A}/c)^2.$$

Раскрывая теперь скобки и выбирая  $\mathbf{u} = (0, u, 0)$  с  $u = -c\mathcal{E}/\mathcal{B}$  (скорость дрейфа), мы обнаруживаем, что вклад электрического поля в

<sup>1</sup>При этом в классической задаче скорость электрона не растёт неограниченно.

гамильтониане перестаёт быть виден, и результат принимает обсуждавшийся ранее вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{(\hat{p}_y - e\mathcal{B}x/c)^2}{2m} + \mu_B \sigma_z \mathcal{B} - up_y + \frac{mu^2}{2}, \quad u = -c \frac{\mathcal{E}}{\mathcal{B}}.$$

Это означает, что состояния системы можно рассматривать как классическое дрейфовое движение со скоростью  $\mathbf{u}$  плюс обычное квантовое движение в магнитном поле, т. е. значения энергии системы можно записать в виде

$$E = \hbar\omega_B \left( n + \frac{1}{2} + \sigma_z \right) + \frac{p_z^2}{2m} - up_y + \frac{mu^2}{2} \quad (\sigma_z = \pm 1). \quad (11.24)$$

Вырождение по  $p_y$ , имевшее место в отсутствие электрического поля, сменилось в нашей задаче вырождением по величине  $p_y - n\hbar\omega_B/u$ .

• Более традиционно, решения уравнения Шредингера с гамильтонианом (11.23) можно искать в виде  $\exp[i(y p_y + z p_z)/\hbar] \varphi(x) \chi(s_z)$ , с заменой сохраняющихся величин на соответствующие числа. После простых переобозначений уравнение Шредингера принимает вид:

$$\begin{aligned} & \frac{\hat{p}_x^2}{2m} \varphi(x) + \frac{m\omega_B^2(x-x_1)^2}{2} \varphi(x) = \\ & = \left( E - \mu_B \sigma_z \mathcal{B} - up_y + \frac{mu^2}{2} - \frac{p_z^2}{2m} \right) \varphi(x), \end{aligned} \quad (11.25)$$

$$\text{где } x_{0B} = \frac{cp_y}{e\mathcal{B}}, \quad x_1 = x_{0B} + \frac{e\mathcal{E}}{m\omega_B^2} \equiv \frac{c}{e\mathcal{B}}(p_y + mu).$$

Таким образом, уровни энергии имеют вид (11.24), а в волновых функциях множители  $\varphi(x)$  выражаются через решения задачи для осциллятора (4.25) в зависимости от  $x - x_1$ .

#### 11.4.5. Двумерный осциллятор в магнитном поле

Задачу о состояниях заряженного симметричного осциллятора в магнитном поле решил в 1928 г. В.А. Фок [23]. Для частного случая отсутствия осцилляторного поля возникающие состояния (11.17) были переоткрыты Л.Д. Ландау в 1930 г. Их называют уровнями Ландау. Простое аналитическое решение имеет и задача о состояниях заряженного анизотропного осциллятора в магнитном поле.

Рассмотрим двумерный (в плоскости  $(x, y)$ ) анизотропный заряженный осциллятор в однородном магнитном поле  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ . Используя векторный потенциал в виде  $\mathbf{A}_L = (0, xB, 0)$  и стандартное обозначение  $\omega_B = eB/mc$ , запишем гамильтониан получившейся задачи в виде суммы гамильтонианов продольного движения (вдоль оси  $z$ ) и поперечного движения  $\hat{H}_\perp$  (ср. (11.21))

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \hat{H}_\perp, \quad (11.26)$$

$$\hat{H}_\perp = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} - \omega_B x \hat{p}_y + \frac{m(\omega_1^2 + \omega_B^2)x^2}{2} + \frac{m\omega_2^2 y^2}{2}.$$

Сделаем замену  $\hat{Y} = -\hat{p}_y/(m\omega_2)$ ,  $\hat{p}_Y = ym\omega_2$  (это, в сущности, — известное каноническое преобразование классической механики). Необязательный множитель  $m\omega_2$  добавлен для того, чтобы сделать одинаковыми размерности «новых» и «старых» координат и импульсов. Знак  $(-)$  в первом из соотношений выбран для того, чтобы у новых «координаты» и «импульса» были те же перестановочные соотношения, что и у старых,  $[\hat{p}_Y, \hat{Y}] = -i\hbar$ .

Теперь гамильтониан поперечного движения принимает вид анизотропного осциллятора (4.26) с  $\omega_1^2 \rightarrow \omega_1^2 + \omega_B^2$ ,  $\omega_2 \rightarrow \omega_2$ ,  $b \rightarrow \omega_B\omega_2$ :

$$\hat{H}_\perp = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_Y^2}{2m} + m\omega_B\omega_2 \hat{x}\hat{Y} + \frac{m(\omega_1^2 + \omega_B^2)\hat{x}^2}{2} + \frac{m\omega_2^2 \hat{Y}^2}{2}. \quad (11.27)$$

Совершим затем поворот в плоскости  $(x, Y)$ , диагонализующий гамильтониан (на такой угол  $\theta$ , что  $\operatorname{tg} 2\theta = 2\omega_B\omega_2/(\omega_1^2 - \omega_2^2 + \omega_B^2)$  (4.27)), и введём стандартным образом (см. (4.3)) операторы уничтожения  $\hat{a}_{kz}$  и рождения  $\hat{a}_{kz}^+ \equiv (\hat{a}_{kz})^+$ , которые в «старых» координатах имеют вид (здесь  $c = \cos \theta$ ,  $s = \sin \theta$ )

$$\hat{a}_{z1} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{m\Omega_1}{\hbar}} \left( cx - is \frac{\hbar}{m\omega_2} \frac{d}{dy} + c \frac{\hbar}{m\Omega_1} \frac{d}{dx} + isy \frac{\omega_2}{\Omega_1} \right), \quad (11.28)$$

$$\hat{a}_{z2} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{m\Omega_2}{\hbar}} \left( -sx - ic \frac{\hbar}{m\omega_2} \frac{d}{dy} - s \frac{\hbar}{m\Omega_2} \frac{d}{dx} + icy \frac{\omega_2}{\Omega_2} \right).$$

После этого  $\hat{H}_\perp$  принимает вид гамильтониана пары осцилляторов с энергиями состояний  $E_{\perp(n_1 n_2)}$  (выражения для частот получены из

(4.32) простым алгебраическим преобразованием):

$$\begin{aligned}\hat{H}_\perp &= \hbar\Omega_1(\hat{a}_{1z}^+\hat{a}_{1z} + 1/2) + \hbar\Omega_2(\hat{a}_{2z}^+\hat{a}_{2z} + 1/2), \\ \Omega_{1,2} &= \frac{\sqrt{(\omega_1 + \omega_2)^2 + \omega_B^2} \pm \sqrt{(\omega_1 - \omega_2)^2 + \omega_B^2}}{2}, \\ E_{\perp(n_1n_2)} &= \hbar\Omega_1(n_1 + 1/2) + \hbar\Omega_2(n_2 + 1/2).\end{aligned}\quad (11.29)$$

Для симметричного осциллятора ( $\omega_1 = \omega_2$ ) имеем  $\Omega_1 - \Omega_2 = \omega_B$ . Частота  $\Omega_1$  может интерпретироваться как частота вращений базового осциллятора в ту же сторону, в которую вращается свободная частица в магнитном поле, а  $\Omega_2$  — в противоположном.

Волновые функции выражаются через функцию основного состояния  $\psi_{00}$  с помощью операторов рождения (11.28), как и в (4.31).

Чтобы найти  $\psi_{00}$ , достаточно решить систему уравнений  $\hat{a}_{1z}\psi_{00}(x, y) = \hat{a}_{2z}\psi_{00}(x, y) = 0$ , что даёт

$$\begin{aligned}\psi_{00}(x, y) &= \left(\frac{4c^2\omega_1\omega_2}{\pi^2}\right)^{1/4} \exp(-c(\omega_1x_1^2 + \omega_2x_2^2) + ic_{12}xy), \\ c &= \frac{m\sqrt{\omega_B^2 + (\omega_1 + \omega_2)^2}}{2\hbar(\omega_1 + \omega_2)}, \quad c_{12} = \frac{m\omega_B\omega_2}{\hbar(\omega_1 + \omega_2)} \equiv \frac{eB\omega_2}{\hbar c(\omega_1 + \omega_2)}.\end{aligned}\quad (11.30)$$

◇ Формы волновых функций и операторов рождения и уничтожения меняются с изменением калибровки векторного потенциала (см. § 11.3). Так, векторный потенциал  $\mathbf{A}_R = \mathcal{B}\left(-\frac{\omega_2}{\omega_1 + \omega_2}y, \frac{\omega_1}{\omega_1 + \omega_2}x, 0\right)$ , получается из использованного выше калибровочным преобразованием

$$\hat{\mathbf{A}}_R = \hat{\mathbf{A}}_L + \nabla f, \quad \text{где } f = -\mathcal{B}xy\omega_2/(\omega_1 + \omega_2).$$

В соответствии с (11.10) это даёт добавку к фазе волновой функции  $-ef/\hbar c$ , «убивающую» вклад  $c_{12}xy$  в показателе экспоненты (11.30).

• При изменении величины поля система проходит через состояния, обладающие некоторыми симметриями, не видимыми в исходном гамильтониане (*скрытые симметрии*). Если поле  $\mathcal{B}_r$  таково, что собственные частоты оказываются в рациональном отношении  $\Omega_1 = r\Omega_2$ , где  $r = m/n$ , а  $m$  и  $n$  — целые, то соответствующие уровни энергии вырождены (обратим внимание, что симметрии с  $r = 1$  не возникает). При этом значении поля в системе появляются новые сохраняющиеся

операторы  $\hat{C}_2^{(1)}$  и  $\hat{C}_1^{(2)}$ . Эти значения поля и операторы таковы:

$$\begin{aligned} \mathcal{B} &= \frac{mc}{e} \sqrt{\omega_1 \omega_2 (r-1)^2 / r - (\omega_1 - \omega_2)^2}; \\ \hat{C}_2^{(1)} &= \hat{a}_{1z}^{+n} \hat{a}_{2z}^m, \quad \hat{C}_1^{(2)} = \hat{a}_{2z}^{+m} \hat{a}_{2z}^n. \end{aligned} \quad (11.31)$$

В частности, при  $r = 2$  спектр энергий есть  $\hbar\Omega_2(N + 3/2)$ , где  $N = 2n_1 + n_2$ , и кратность вырождения равна  $n + 1$  при  $N = 2n$  и при  $N = 2n + 1$ .

### § 11.5. Движение спина в магнитном поле

Уравнение движения спина электрона в магнитном поле (с учётом перестановочных соотношений (10.1)) имеет вид

$$i\hbar \frac{d\mathbf{s}}{dt} = [\mathbf{s}, \hat{H}] \equiv -i[\mathcal{M}_s \times \mathcal{B}] = -ig_e \mu_B [\mathbf{s} \times \mathcal{B}]. \quad (11.32)$$

Согласно этому уравнению, спин прецессирует вокруг направления магнитного поля, т.е. компонента спина, направленная вдоль поля, неизменна, а поперечная компонента вращается с угловой скоростью  $\boldsymbol{\omega} = (g_e/2)(\mu_B/\hbar)\mathcal{B} = (g_e/2)(e\mathcal{B}/mc)$ .

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  $E_{\pm} = \mp(g_e/2)\mu_B\mathcal{B}$ . В соответствии с уравнением Шредингера для зависимости от времени, каждая из этих компонент меняется со временем по разному,

$$\chi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-iE_+t/\hbar} \\ e^{-iE_-t/\hbar} \end{pmatrix} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i(g_e/2)\mu_B\mathcal{B}t/\hbar} \\ e^{-i(g_e/2)\mu_B\mathcal{B}t/\hbar} \end{pmatrix}.$$

В соответствии с решением задачи 9.6 это и означает, что направление спина меняется со временем по закону ( $\varphi$  — азимутальный угол)

$$\varphi = t(E_- - E_+)/\hbar \equiv g_e \mu_B \mathcal{B} t / \hbar = g_e (e\mathcal{B}/mc) t,$$

т.е. спин вращается с угловой скоростью  $g_e(e\mathcal{B}/mc)$ .

◇ Уравнение для скорости электрона в однородном магнитном поле  $d\mathbf{v}/dt = (e/mc) \mathbf{v} \times \mathbf{B}$  похоже на классическое (11.32). Вектор скорости прецессирует вокруг направления поля  $\mathbf{B}$  с циклотронной частотой  $e\mathcal{B}/mc$  (11.17). 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 относительной погрешностью 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 с ненулевым магнитным моментом импульс начинает зависеть от координаты. Вычисляя по общим правилам  $d\mathbf{p}/dt = [\mathbf{p}, \hat{H}]/i\hbar$  с учётом (10.1), получаем соотношение, имеющее тот же вид, что и в электродинамике

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla \{g\mu_B (\mathbf{s}\mathbf{B})\}. \quad (11.33)$$

Помимо формального вывода, полезно дать ещё одно объяснение этому выражению для «силы», действующей на частицу.

Известно, что стационарное магнитное поле энергию частицы не меняет (магнитная составляющая силы Лоренца перпендикулярна скорости). Когда спиновая частица проходит меняющееся в пространстве магнитное поле, её полная энергия не меняется, а вот энергия ориентации спина в этом поле  $-(\mathcal{M}\mathbf{B})$  меняется. Это изменение компенсируется изменением кинетической энергии, т. е. и скорости, что и описывается соотношением (11.33). В опытах Штерна и Герлаха, открывших существование спина, первоначальный монохроматический пучок разделился на два в соответствии с двумя возможными ориентациями спина.

• Если движение квазиклассично, усреднение уравнения движения для спина по волновому пакету даёт для средних значений  $d\mathbf{s}/dt = (ge/2mc)\mathbf{s} \times \mathbf{B}$ . Поскольку намагниченность вещества  $M$  определяется спинами его электронов, отсюда следует уравнение Ландау–

Лифшица для намагниченности (отличим  $g$  от 2 пренебрегаем):

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \frac{e}{mc} [\mathbf{M} \times \mathbf{B}] \equiv [\boldsymbol{\omega}_B \times \mathbf{M}].$$

### § 11.6. Эффект Ааронова–Бома

В классической механике и электродинамике движение частиц полностью определялось напряжённостями полей в той точке, где находится частица. Потенциалы не определяются однозначно этими полями, они вводились как вспомогательные понятия, удобные для глобального описания и позволяющие упростить некоторые формулы. В квантовой механике эволюцию волновой функции определяет гамильтониан (11.7), куда явным образом входит векторный потенциал. Поэтому дело выглядит так, как будто в квантовой механике движение частиц зависит от вида потенциала, включая его калибровку. Мы покажем, что это не так. Взамен мы обнаружим, как покажется на первый взгляд, что на движение в данной точке влияет поле, не локализованное в этой точке. Мы увидим, что и этой несообразности нет.

Начнём с важного замечания. При наличии электромагнитного поля изменение квазиклассической фазы волновой функции на пути  $\mathcal{L}$ , вычисляемое так же, как в § 6.1, меняет свою форму по сравнению с тем, что получалось в том разделе,

$$\psi \propto \exp \left\{ i \frac{\int \mathbf{p}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}{\hbar} \right\} \Rightarrow \psi \propto e^{i\beta_{\mathcal{L}}}, \quad \beta_{\mathcal{L}} = \frac{\int [\mathbf{p}(\mathbf{r}) - e\mathbf{A}(\mathbf{r})/c] d\mathbf{r}}{\hbar}. \quad (11.34)$$

Здесь интегралы берутся по классической траектории электрона  $\mathcal{L}$ . Содержание эффекта удобно продемонстрировать на примере эксперимента<sup>1</sup> схема, которого приведена на рис. 9. Это — обычный эксперимент по наблюдению дифракции электронов на двух щелях (источник слева, экран справа). Единственное отличие от стандартной схемы — бесконечно длинный соленоид небольшого радиуса (расположенный перпендикулярно движению частицы), внутри которого сосредоточен магнитный поток  $\Phi$  и который окружён непроницаемым для частиц цилиндрическим экраном. Оба классических пути движения частиц проходят по пространству, где действующих на электроны полей нет

<sup>1</sup>На возможность такого эффекта указали У. Эренберг и Р. Э. Сайди (1949). Подробное теоретическое изучение выполнено Я. Аароновым и Д. Бомом (1959).

(за исключением полей, формирующих щели). На первый взгляд, наблюдаемая дифракционная картина должна определяться только геометрической разностью хода на «верхнем» и «нижнем» показанных путях. Наличие соленоида с магнитным потоком кардинально меняет картину.

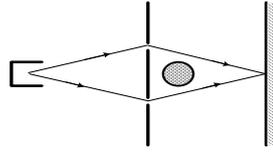


Рис. 9. Схема опыта Ааронова–Бома

Обозначим «верхний» путь электрона через  $\mathcal{L}_1$ , а «нижний» — через  $\mathcal{L}_2$  и соответствующие «набеги фаз» на этих путях через  $\beta_1$  и  $\beta_2$ . Тогда интерференционное слагаемое в квадрате амплитуды суммарной вероятности, которое и определяет наблюдаемую дифракционную картину, можно записать в виде

$$\psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1 \propto \operatorname{Re} \left[ e^{i(\beta_1 - \beta_2)} \right] \equiv \operatorname{Re} \left[ e^{i(\phi_g + \phi_A)} \right].$$

Здесь мы использовали преобразование

$$\beta_1 - \beta_2 = \phi_g + \phi_A, \quad \text{где } \phi_g = \frac{1}{\hbar} \int_{\mathcal{L}_1 - \mathcal{L}_2} \mathbf{p}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad \phi_A = -\frac{e}{\hbar c} \int_{\mathcal{L}_1 - \mathcal{L}_2} \mathbf{A}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

В величинах  $\phi_g$  и  $\phi_A$  интегралы представляют собой разности интегралов по «верхнему» и «нижнему» путям, т.е. интегралы по замкнутой траектории  $\mathcal{L}_1 - \mathcal{L}_2$ , фактически изображенной на рисунке.

Первое слагаемое  $\phi_g$  представляет собой обычную геометрическую разность фаз, возникающую в отсутствие поля. Она «смазывается» при учёте «соседних» траекторий, формирующих волновой пакет.

Второе слагаемое  $\phi_A$  появилось из-за того, что векторный потенциал в области движения частицы отличен от нуля. Но ведь векторный потенциал — нефизический объект, он не определяется однозначно наблюдениями. Как же он может влиять на наблюдаемый эффект? Эта кажущаяся несообразность разрешается, если вспомнить теорему Стокса, согласно которой интеграл от векторного потенциала по замкнутому контуру есть поток вектора его ротора (т.е. магнитного поля) через этот контур — магнитный поток через этот контур. Таким образом, «магнитная» фаза  $\phi_A = -e\Phi/(\hbar c)$  — нормальная физически измеримая величина, не зависящая от калибровки. Поскольку магнитного поля на «пути» электрона нет, эта фаза одинакова для всех компонент волнового пакета.

◇ При изменении магнитного потока максимумы и минимумы дифракционной картины сдвигаются по закону  $\cos(2\pi\Phi/\Phi_0)$ , где  $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/e$  — введённый в (11.20) квант магнитного потока, т. е. картина осциллирует (периодически меняется) с изменением магнитного поля. Чтобы наблюдать этот эффект, радиус соленоида должен быть не очень велик по сравнению с длиной волны электрона  $2\pi\hbar/p$ . В экспериментах по наблюдению этих осцилляций использовался соленоид с радиусом до 14 мкм, магнитным потоком которого можно было управлять. Наблюдения показали хорошее согласие с расчётом.

◇ Итак, калибровочная независимость физических объектов «спасена». Но, кажется, мы обнаружили, что на движение в данной точке влияет поле, не локализованное в этой точке, т. е. нарушен обычно предполагаемый «принцип локальности». Однако и этого нарушения нет. Действительно, дифракция может наблюдаться только если электроны на каждом из путей когерентны, а это означает, что оба они являются частями одного волнового пакета, который «накрывает» и соленоид, в этом пакете разброс координат электрона превышает размер соленоида [24].

### § 11.7. Задачи

*В задачах 1–5 электроны и нейтроны движутся вдоль оси  $x$ .*

1. Найти относительные интенсивности расщеплённых пучков нейтронов в опыте Штерна–Герлаха, если они первоначально поляризованы вдоль оси  $x$ , а магнитное поле направлено в плоскости  $yz$  под углом  $45^\circ$  к оси  $z$ .
2. Электроны, первоначально поляризованные вдоль оси  $x$ , проходят последовательно фильтры, пропускающие частицы, поляризованные вдоль оси  $z$  (вверх), и под углом  $\theta$  к оси  $z$  — в плоскости  $yz$ . Найти долю прошедших частиц.
3. Пучок нейтронов (спин  $1/2$ ) попадает при  $x = 0$  в область однородного магнитного поля одного из двух направлений
 

a)	$(0, 0, B)$ ,
b)	$(0, B, 0)$ .

В каждом варианте найти коэффициенты отражения и направление спина для отраженных нейтронов, первоначально поляризованных по оси  $x$  или по оси  $z$  вверх или вниз (используйте (2.36)). Найти вероятность переворота спина.

Найти эти же величины в случае, когда магнитное поле отличается от нуля только в области  $0 \leq x \leq L$ .

4. Пучок нейтронов, поляризованных вдоль оси  $x$ , влетает в однородное магнитное поле  $(0, 0, B)$ . 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  $\theta$ ;
  - б) он проходит область длиной  $L$  с однородным магнитным полем  $(0, 0, B)$ ; затем пучок проходит через фильтр, пропускающий лишь нейтроны, поляризованные под углом  $\theta$  к оси  $x$  в плоскости  $xz$ .
6. Докажите (11.8). Для движения в однородном магнитном поле найдите коммутаторы  $[\hat{x}_c, \hat{v}_x]$ ,  $[\hat{x}_c, \hat{v}_y]$ .
7. Найти операторы скорости  $\hat{\mathbf{v}}$  и ускорения  $\hat{\mathbf{a}}$  нейтральной частицы (например, нейтрона), находящейся в магнитном поле.
8. Выразить волновую функцию (11.22b) через волновые функции (11.22a).
9. Показать, что 
$$\left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 - 2m \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B} = \left( \boldsymbol{\sigma} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right) \right)^2.$$
10. Найти зависимость от времени спиновой функции и средних значений компонент спина нейтральной частицы со спином  $s = 1/2$  и магнитным моментом  $\mu$ , находящейся в однородном постоянном магнитном поле  $\mathbf{B}$ .
11. Обобщить результат предыдущей задачи на случай однородного непостоянного магнитного поля, направление которого остаётся неизменным, т. е.  $\mathbf{B}(t) = B(t) \mathbf{n}_0$ .
12. Частица со спином  $s = 1/2$  и магнитным моментом  $\mu$  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  $B_0, B_1, \omega_0$  — 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  $\omega_0$  в этом случае.

*Указание.* Перейти во вращающуюся систему отсчёта.

## Глава 12

### Сложение моментов

Начиная с этой главы и орбитальный момент  $\ell$  и спин  $s$  часто обозначаются одной и той же буквой  $j$ . Для операторов  $\hat{j}_i$  справедливы перестановочные соотношения вида (8.3), но связь с координатами типа (8.25), вообще говоря, отсутствует. Для определённости примем  $j_1 \geq j_2$ .

#### § 12.1. 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 самосогласованном поле ядра и остальных электронов, определены моменты каждого электрона. При учёте различия взаимодействия между электронами от взаимодействия с их усреднённым распределением, эта сферическая симметрия для отдельных электронов нарушается, т. е. моменты отдельных электронов не сохраняются, но сохраняется суммарный момент всех электронов.*

◇ Итак, пусть рассматриваемую сферически симметричную систему можно разбить на две подсистемы так, что каждая из них 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  $\hat{j}_1$  и  $\hat{j}_2$ . Взаимодействие часто зависит от относительной ориентации этих моментов так, что соответствующее возмущение можно записать в виде  $\hat{V} = 2A(\hat{j}_1\hat{j}_2)$ .

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 опе-

ратор суммарного момента импульса системы  $\hat{j}$ :

$$\hat{V} = A \left( \hat{j}^2 - \hat{j}_1^2 - \hat{j}_2^2 \right), \quad (\hat{j} = \hat{j}_1 + \hat{j}_2). \quad (12.1)$$

Из перестановочных соотношений (8.3), (8.9) для операторов  $\hat{j}_{1i}$  и  $\hat{j}_{2i}$  получаются 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. 8, и собственные значения оператора (12.1) имеют вид  $A[j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)]$ .

В этой главе мы снабжаем векторы рассматриваемых состояний момента значком  $_k$  внизу, обозначающим номер рассматриваемой подсистемы,  $k = 1, 2$  или  $sum$  так, что  $|j, m\rangle_k$  означает состояние с моментом  $j$  и его проекцией  $m$  на ось  $z$  для первого момента при  $k = 1$ , для второго момента при  $k = 2$  и для суммарного момента при  $k = sum$ .

Итак, требуется по известным состояниям  $|j_1, m_1\rangle_1, |j_2, m_2\rangle_2$  построить собственные состояния оператора полного момента  $|j, m\rangle_{sum}$ .

Состояние системы можно описать, используя два разных базиса.

**I.** Собственные состояния  $|j_1, m_1\rangle_1 |j_2, m_2\rangle_2$  операторов  $\hat{j}_1^2, \hat{j}_{1z}, \hat{j}_2^2, \hat{j}_{2z}$  с собственными значениями  $j_1(j_1+1), m_1, j_2(j_2+1), m_2$ .

**II.** Собственные состояния  $|j, m, j_1, j_2\rangle_{sum}$  операторов  $\hat{j}^2, \hat{j}_z, \hat{j}_1^2, \hat{j}_2^2$  с собственными значениями  $j(j+1), m, j_1(j_1+1), j_2(j_2+1)$ .

◇ *Проблемой сложения моментов* называют набор задач, связанных с переходом от базиса  $_{1,2}$  к базису  $_{sum}$  (и от  $_{sum}$  к  $_{1,2}$ ).

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 чётности суммарных состояний?
4. Ясно, что любая функция  $_{sum}$  может быть выражена через линейные комбинации функций  $_{sep}$ , и наоборот:

$$\begin{aligned} |j, m; j_1, j_2\rangle_{sum} &= \sum_{m_i} C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{j m} |j_1, m_1\rangle_1 |j_2, m_2\rangle_2; \\ |j_1, m_1\rangle_1 |j_2, m_2\rangle_2 &= \sum_{j, m} \tilde{C}_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{j m} |j, m; j_1, j_2\rangle_{sum}. \end{aligned} \quad (12.2)$$

Найти определённые в (12.2) коэффициенты Клебша–Гордана  $C$  и  $\tilde{C}$ .

◇ Из определения видно, что

$$\begin{aligned} \tilde{C}_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{jm} &= \langle j_1, m_1, j_2, m_2 | j, m, j_1, j_2 \rangle_{sum} \\ C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{jm} &= sum \langle j, m, j_1, j_2 | j_1, m_1, j_2, m_2 \rangle = \left( \tilde{C}_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{jm} \right)^\dagger. \end{aligned}$$

Без ограничения общности, коэффициенты Клебша–Гордана  $C$  выбирают вещественными, при этом

$$C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{jm} = \tilde{C}_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{jm}. \quad (12.3)$$

Далее мы сначала изложим результаты, а затем опишем способ отыскания коэффициентов Клебша–Гордана и убедимся в полноте полученной конструкции. Это и составит полное решение задачи.

### 12.1.1. Регулярный метод

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 квантовыми.

1. Так как  $\hat{j}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}$ , то

$$m = m_1 + m_2. \quad (12.4a)$$

2. Величина  $j$  принимает значения

$$j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2, \dots, |j_1 - j_2|. \quad (12.4b)$$

3. Чётность состояний суммарного момента  $\mathcal{P}$  не определяется величиной  $j$ , но всегда  $\mathcal{P} = \mathcal{P}_1 \cdot \mathcal{P}_2$ , где  $\mathcal{P}_i$  — чётности состояний  $|j_i, m_i\rangle$ . Для спинового момента понятие чётности не определено (*спин* — внутренняя степень свободы).

∇ Чтобы убедиться, что в ответах (12.4) учтены все состояния, пересчитаем их в обоих описаниях системы.

Число различных состояний, определяемое через состояния складываемых моментов (*размерность базиса  $I$* ), 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 значениям  $j$ , допустимым при данных  $j_1$  и  $j_2$ :

$$\begin{aligned} \sum_{|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) &= \sum_0^{j_1+j_2} (2j+1) - \sum_0^{|j_1-j_2|-1} (2j+1) = \\ &= (j_1+j_2+1)^2 - |j_1-j_2|^2 = (2j_1+1)(2j_2+1). \end{aligned}$$

Как и следовало ожидать, это число совпадает с  $N$ , т. е. *размерности базисов I и II совпадают*.

• Построим теперь векторы состояний  $|j, j_z = m\rangle_{sum}$  из векторов исходного базиса  $|j_1, m_1\rangle_1 |j_2, m_2\rangle_2$ . Коэффициенты этого разложения и есть коэффициенты Клебша–Гордана (*которые можно найти в многочисленных таблицах*). Тем самым мы докажем (12.4b). Основная идея нашего построения — для каждого допустимого значения суммарного момента  $j$  должны реализовываться все возможные значения проекций этого момента.

Пример. Начнём с одной из простейших задач — со сложения орбитального момента  $j_1 = 1$  и спинового момента  $j_2 = 1/2$ . Суммарные значения момента импульса такой системы  $j$  могут составлять  $3/2$  (моменты «параллельны») и  $1/2$  (моменты «антипараллельны»). Набор базисных состояний нашей системы состоит из 6 векторов. На языке суммарных моментов это  $|3/2, m\rangle_{sum}$  с  $m = (\pm 3/2, \pm 1/2)$  и  $|1/2, m\rangle_{sum}$  с  $m = \pm 1/2$ . На языке складываемых моментов это

$$\begin{aligned} |I\rangle &\equiv |1, +1\rangle_1 |1/2, +1/2\rangle_2, & |II\rangle &\equiv |1, +1\rangle_1 |1/2, -1/2\rangle_2, \\ |III\rangle &\equiv |1, 0\rangle_1 |1/2, +1/2\rangle_2, & |IV\rangle &\equiv |1, 0\rangle_1 |1/2, -1/2\rangle_2, \\ |V\rangle &\equiv |1, -1\rangle_1 |1/2, +1/2\rangle_2, & |VI\rangle &\equiv |1, -1\rangle_1 |1/2, -1/2\rangle_2. \end{aligned}$$

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

$$|3/2, 3/2\rangle_{sum} = |I\rangle \equiv |1, +1\rangle_1 |1/2, +1/2\rangle_2. \quad (12.5a)$$

Векторы  $|II\rangle$  и  $|III\rangle$  отвечают проекции полного момента на ось  $z$ , равной  $1/2$ , это может реализовываться и при  $j = 3/2$ , и при  $j = 1/2$ .

Поэтому состояния  $|3/2, 1/2\rangle_{sum}$  и  $|1/2, 1/2\rangle_{sum}$  должны быть *суперпозициями* состояний  $|II\rangle$  и  $|III\rangle$ .

Векторы  $|IV\rangle$  и  $|V\rangle$  отвечают проекции полного момента на ось  $z$ , равной  $-1/2$ , это может реализовываться и при  $j = 3/2$ , и при  $j = 1/2$ . Поэтому состояния  $|3/2, -1/2\rangle_{sum}$  и  $|1/2, -1/2\rangle_{sum}$  должны быть *суперпозициями* состояний  $|IV\rangle$  и  $|V\rangle$ .

Наконец, вектор  $|VI\rangle$  — единственный вектор, который отвечает проекции полного момента на ось  $z$ , равной  $-3/2$ , это может реализовываться только при  $j = 3/2$ . Поэтому  $|3/2, -3/2\rangle_{sum} \propto |VI\rangle$  (этот вектор может отличаться знаком от того, что получается с помощью используемого ниже алгоритма).

Подойдем к равенству (12.5a) понижающим оператором  $\hat{j}_- \equiv \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$ . Для действия на левую часть равенства мы используем этот оператор в форме  $\hat{j}_-$ , а на правую часть — в форме  $\hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$ , заметив, что  $\hat{j}_{1-}|1, 1\rangle = \sqrt{2}|1, 0\rangle$  и  $\hat{j}_{2-}|1/2, 1/2\rangle = |1/2, -1/2\rangle$ :

$$\begin{aligned} \hat{j}_- |3/2, 3/2\rangle_{sum} &= \sqrt{3} \cdot |3/2, 1/2\rangle_{sum}, \\ (\hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}) |1, 1\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_2 &= \sqrt{2}|1, 0\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_2 + |1, 1\rangle_1 \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_2. \end{aligned}$$

Собирая эти выражения, мы получаем

$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle_{sum} &= \sqrt{2/3} \cdot |1, 0\rangle \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle + \sqrt{1/3} \cdot |1, 1\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv \\ &\equiv \sqrt{2/3} \cdot |II\rangle + \sqrt{1/3} \cdot |III\rangle. \end{aligned} \quad (12.5b)$$

Состояние  $|1/2, 1/2\rangle_{sum}$  строится из тех же состояний  $|II\rangle$  и  $|III\rangle$ , и оно ортогонально к состоянию  $|3/2, 1/2\rangle_{sum}$ . Поэтому вектор этого состояния имеет вид

$$|1/2, 1/2\rangle_{sum} = \sqrt{1/3} \cdot |II\rangle - \sqrt{2/3} \cdot |III\rangle. \quad (12.5c)$$

Сходным образом действие оператора  $\hat{j}_- \equiv \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$  на равенства (12.5b) и (12.5c) и повторное действие этого оператора на получившиеся равенства дают

$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{sum} &= \sqrt{\frac{1}{3}} \cdot |IV\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot |V\rangle, \\ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_{sum} &= \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot |IV\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} \cdot |V\rangle; \quad \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle_{sum} = |VI\rangle. \end{aligned} \quad (12.5d)$$

Появившиеся в равенствах (12.5) числа  $\pm\sqrt{1/3}$ ,  $\sqrt{2/3}$  — это коэффициенты Клебша–Гордана.

По этому образцу строится и **процедура общего случая**.

∇ В силу (12.4а), максимальное значение  $m = j_1 + j_2$ . Поэтому и максимальное значение  $j = j_1 + j_2$ . Это состояние получается единственным образом. Поэтому

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle_{sum} = |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2.$$

∇ 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 учётом (8.18)

$$\begin{aligned} \hat{j}_- |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle_{sum} &= \sqrt{2(j_1 + j_2)} \cdot |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle_{sum} \equiv \\ &\equiv (\hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}) |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2 = \\ &= \sqrt{2j_1} \cdot |j_1, j_1 - 1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2 + \sqrt{2j_2} \cdot |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2 - 1\rangle_2. \end{aligned}$$

Отсюда следует

$$\begin{aligned} &|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle_{sum} = \\ &= \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2 + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2 - 1\rangle_2. \end{aligned} \quad (12.6a)$$

Из двух векторов состояний, стоящих в правой части этого равенства, можно сформировать другой вектор состояния, ортогональный к (12.6а). 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.

$$\begin{aligned} &|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle_{sum} = \\ &= \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1 - 1\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2 - \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2 - 1\rangle_2. \end{aligned} \quad (12.6b)$$

∇ Дальнейшее действие оператора  $\hat{j}_-$  на состояния (12.6) даёт состояния  $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2\rangle_{sum}$  и  $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle_{sum}$ . Эти два новых состояния — суперпозиции состояний 1-го базиса,  $|j_1, j_1 - 2\rangle_1 |j_2, j_2\rangle_2$ ,

$|j_1, j_1-1\rangle_1 |j_2, j_2-1\rangle_2, |j_1, j_1\rangle_1 |j_2, j_2-2\rangle_2$ . Сформированное из этих базисных состояний третье состояние, ортогональное к двум первым, есть  $|j_1+j_2-2, j_1+j_2-2\rangle_{sum}$ .

∇ Этот процесс появления новых значений  $j$  продолжается до тех пор, пока с уменьшением  $m$  увеличивается число допустимых различных базисных функций  $|j_1, m_1\rangle_1 |j_2, m_2 = m - m_1\rangle_2$ , т. е. до  $m = j_1 - j_2$ .

∇ На языке *теории представлений групп* векторы состояний с моментом  $j$  реализуют  $(2j+1)$ -мерное неприводимое представление группы вращений. Состояние, составленное из пары состояний с различными моментами, образует приводимое представление той же группы вращений, которое является прямым произведением двух неприводимых. Полученное решение означает, что произведение неприводимых представлений размерностей  $2j_1 + 1$  и  $2j_2 + 1$  разбивается на сумму неприводимых представлений с размерностями  $2j + 1$ , где  $j$  пробегает значения  $j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$ .

### • Важные частные случаи.

∇ Для пары частиц со спином  $1/2$  волновые функции состояний с суммарным спином  $0$  и  $1$  в обозначениях § 10.2 можно записать в виде

$$\begin{aligned} |0, 0\rangle_{sum} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right), \\ |1, 1\rangle_{sum} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2, \quad |1, -1\rangle_{sum} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2, \\ |1, 0\rangle_{sum} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_2 + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_2 \right). \end{aligned} \quad (12.7)$$

∇ При сложении момента  $\ell = 1$  и спина  $s = 1$  волновые функции состояний с полным моментом  $j = 0, 1$  и  $2$  и  $m = 0$  имеют вид

$$\begin{aligned} |2, 0\rangle_{sum} &= \frac{|1, 1\rangle_\ell |1, -1\rangle_s + |1, -1\rangle_\ell |1, 1\rangle_s}{2} + \frac{|1, 0\rangle_\ell |1, 0\rangle_s}{\sqrt{2}}, \\ |1, 0\rangle_{sum} &= \frac{|1, 1\rangle_\ell |1, -1\rangle_s - |1, -1\rangle_\ell |1, 1\rangle_s}{\sqrt{2}}, \\ |0, 0\rangle_{sum} &= \frac{|1, 1\rangle_\ell |1, -1\rangle_s + |1, -1\rangle_\ell |1, 1\rangle_s}{2} - \frac{|1, 0\rangle_\ell |1, 0\rangle_s}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (12.8)$$

∇ Для пары векторов  $a_i$  и  $b_k$  можно записать

$$a_i b_k = Q_{ik} + e_{ikr} V_r + S \delta_{ij},$$

$$\bar{S} = (ab), \quad Q_{ik} = \frac{a_i b_k + a_k b_i}{2} - S \delta_{ik}, \quad V_r = \frac{1}{2} e_{rik} a_i b_k.$$

Величина  $S$  — скаляр, отвечающий суммарному моменту  $\ell = 0$ ,  $V_r$  — трёхкомпонентный вектор (векторное произведение векторов  $a_i$  и  $b_k$ ), отвечающий моменту 1, а  $Q_{ik}$  — пятикомпонентный тензор 2 ранга с нулевым следом, отвечающий моменту 2. Это равенство можно рассматривать как ещё один пример сложения двух одинаковых моментов 1. Обратите внимание, что все члены суммы имеют одинаковую пространственную чётность.

### 12.1.2. Другие методы вычисления коэффициентов

Изложенный выше метод даёт полное решение задачи, но нередко это решение оказывается громоздким. Так, при сложении моментов 3 и 2 для построения состояния суммарного момента  $|j = 2, m = 1\rangle$  в этом методе требуется пройти по меньшей мере 14 шагов.

Мы рассмотрим ниже некоторые методы, которые позволят получить коэффициенты Клебша–Гордана без предварительного вычисления других коэффициентов. Эти методы основаны на той же идее, что и выше: для каждого состояния  $|j, m\rangle$  имеет место соотношение

$$|j, m\rangle_{sum} = \sum_i C_i |j_1, m_i\rangle_1 |j_2, m - m_i\rangle_2. \quad (12.9)$$

Коэффициенты  $C_i$  — это коэффициенты Клебша–Гордана, определяемые в этих методах с точностью до общего знака.

◇ В методе  $\hat{j}^2$  исходным является легко проверяемое равенство

$$\hat{j}^2 = \hat{j}_1^2 + \hat{j}_2^2 + \hat{j}_{1+}\hat{j}_{2-} + \hat{j}_{1-}\hat{j}_{2+} + 2\hat{j}_{1z}\hat{j}_{2z}. \quad (12.10)$$

Продемонстрируем метод на примере случая  $j_1 = 2, j_2 = 1$  и  $j = 2, m = 1$ , когда соотношение (12.9) принимает вид

$$|2, 1\rangle_{sum} = B_1 |2, 2\rangle_1 |1, -1\rangle_2 + B_2 |2, 1\rangle_1 |1, 0\rangle_2 + B_3 |2, 0\rangle_1 |1, 1\rangle_2 \quad (12.11)$$

с коэффициентами  $B_i$ , подлежащими определению.

Применение к этому состоянию оператора (12.10) даёт (ниже вторая строка — результат действия оператора  $\hat{j}_1^2 + \hat{j}_2^2 + 2\hat{j}_{1z}\hat{j}_{2z}$ , а третья и четвёртая строки — оператора  $\hat{j}_{1+}\hat{j}_{2-} + \hat{j}_{1-}\hat{j}_{2+}$ ):

$$\begin{aligned} & 6B_1|2, 2\rangle_1|1, -1\rangle_2 + 6B_2|2, 1\rangle_1|1, 0\rangle_2 + 6B_3|2, 0\rangle_1|1, 1\rangle_2 = \\ & = (8 - 4)B_1|2, 2\rangle_1|1, -1\rangle_2 + 8B_2|2, 1\rangle_1|1, 0\rangle_2 + 8B_3|2, 0\rangle_1|1, 1\rangle_2 + \\ & + \sqrt{4 \cdot 1} \sqrt{4 \cdot 2} B_1|2, 1\rangle_1|1, 0\rangle_2 + \sqrt{1 \cdot 4} \sqrt{1 \cdot 2} B_2|2, 2\rangle_1|1, -1\rangle_2 + \\ & + \sqrt{3 \cdot 2} \sqrt{1 \cdot 2} B_2|2, 0\rangle_1|1, 1\rangle_2 + \sqrt{3 \cdot 2} \sqrt{1 \cdot 2} B_3|2, 1\rangle_1|1, 0\rangle_2. \end{aligned}$$

Запишем ещё действие того же оператора в виде равенства

$$\hat{j}^2|j, m\rangle_{sum} = j(j+1)|j, m\rangle_{sum} (\equiv 6|j, m\rangle_{sum}).$$

Приравнивая коэффициенты при одинаковых функциях  $|j, m\rangle_1|j', m'\rangle_2$ , получаем  $6B_1 = 4B_1 + \sqrt{8}B_2$ ,  $6B_2 = 8B_2 + \sqrt{32}B_1 + \sqrt{12}B_3$ ,  $6B_3 = 8B_3 + \sqrt{12}B_2$ . (Легко обнаруживается, что одно из этих равенств следует из двух других.) С учётом условия нормировки получаем

$$B_1 = \sqrt{1/3}, \quad B_2 = \sqrt{1/6}, \quad B_3 = -\sqrt{1/2}$$

◇ **Метод повышающего оператора** удобен для построения состояний  $|j, m = j\rangle_{sum}$ . Поясним его на примере сложения моментов  $j_1 = 3$  и  $j_2 = 2$  для состояния с суммарным моментом  $j = 2$ .

Для этой задачи соотношение (12.9) имеет вид

$$\begin{aligned} |2, 2\rangle_{sum} &= A_1|3, 3\rangle_1|2, -1\rangle_2 + \\ &+ A_2|3, 2\rangle_1|2, 0\rangle_2 + A_3|3, 1\rangle_1|2, 1\rangle_2 + A_4|3, 0\rangle_1|2, 2\rangle_2. \end{aligned} \quad (12.12)$$

Под действием повышающего оператора  $\hat{j}_+$  вектор состояния  $|2, 2\rangle_{sum}$  обращается в нуль. Запишем  $\hat{j}_+|2, 2\rangle_{sum} = (\hat{j}_{+,1} + \hat{j}_{+,2})|2, 2\rangle_{sum} = 0$ . Подставляя сюда разбиение (12.12) и используя (8.18) в виде, например,  $\hat{j}_{+,2}|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle = \sqrt{(j_2 - m)(j_2 + m + 1)}|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2 + 1\rangle$  найдём

$$\begin{aligned} 0 &= A_1|3, 3\rangle_1\sqrt{3 \cdot 2}|2, 0\rangle_2 + A_2 \left( \sqrt{1 \cdot 6}|3, \rangle_1|2, 0\rangle_2 + |3, 2\rangle_1\sqrt{2 \cdot 3}|2, 1\rangle_2 \right) + \\ &+ A_3 \left( \sqrt{2 \cdot 5}|3, 2\rangle_1|2, 1\rangle_2 + \sqrt{1 \cdot 4}|3, 1\rangle_1|2, 2\rangle_2 \right) + A_4\sqrt{3 \cdot 4}|3, 1\rangle_1|2, 2\rangle_2. \end{aligned}$$

Собирая коэффициенты при одинаковых слагаемых, получим три уравнения на коэффициенты и их решения

$$\begin{aligned}\sqrt{6}A_1 + \sqrt{6}A_2 &= 0, & \sqrt{6}A_2 + \sqrt{10}A_3 &= 0, & \sqrt{4}A_3 + \sqrt{12}A_4 &\Rightarrow \\ \Rightarrow A_2 &= -A_1, & A_3 &= \sqrt{3/5}A_1, & A_4 &= -\sqrt{5}A_1 \Rightarrow \\ \Rightarrow A_1 &= -A_2 = \sqrt{5/14}, & A_3 &= -\sqrt{3/14}, & A_4 &= \sqrt{1/14}.\end{aligned}$$

(Последняя строка получена из условия нормировки  $\sum A_i^2 = 1$ ).

◇ В задаче 12.8 сформулирован фактически **метод проекционного оператора**, удобный в некоторых теоретических исследованиях.

## § 12.2. Матричные элементы скаляров и векторов

### 12.2.1. Правила отбора

Для атома в целом момент импульса сохраняется. Поэтому его состояние можно классифицировать по значениям полного момента импульса  $j$  и его проекции на избранную ось  $m$ , обозначая через  $\alpha$  остальные, не зависящие от момента характеристики. Нередко в этот набор полезно добавить значение чётности 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 упрощает анализ многих проблем.

*Пример. Состояния гармонического осциллятора.*

Правила отбора могут записываться по любым квантовым числам, и мы начнём с простейшего примера. Рассмотрим набор собственных

состояний осциллятора  $|n\rangle$ , операторы  $\hat{A}_1 = a_1 x$ ,  $\hat{A}_2 = a_2 x^2$ , ...,  $\hat{A}_k = a_k x^k$  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  $\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{a} + \hat{a}^+)$  (4.14), а матричный элемент  $\langle m|\hat{a}|n\rangle$

отличен от нуля только при  $m = n - 1$  и матричный элемент  $\langle m|\hat{a}^+|n\rangle$  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 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.

### Правила отбора для состояний момента импульса.

Как обычно, мы обозначаем через  $|jm\rangle$  собственный вектор операторов  $\hat{j}^2$  и  $\hat{j}_z$  с собственными значениями  $j(j+1)$  и  $m$  соответственно.

• **Скалярный оператор.** Скалярным называется оператор  $\hat{S}$ , вид которого не меняется при вращениях системы координат. Такой оператор коммутирует с оператором момента импульса системы  $\hat{j}$  (8.7), т. е.

$$[\hat{j}_i, \hat{S}] = 0 \Rightarrow [\hat{j}_z, \hat{S}] = 0, \quad [\hat{j}^2, \hat{S}] = 0.$$

Равенство  $[\hat{j}_z, \hat{S}] = 0$  означает, что:

$\langle j'm'|\hat{j}_z\hat{S} - \hat{S}\hat{j}_z|jm\rangle = (m' - m) \cdot \langle j'm'|\hat{S}|jm\rangle = 0$ , т. е. матричный элемент  $\langle j'm'|\hat{S}|jm\rangle$  может отличаться от нуля лишь при  $m' = m$ .

Соотношения  $[\hat{j}^2, \hat{S}] = 0$  означает, что  $\langle j'm'|\hat{j}^2\hat{S} - \hat{S}\hat{j}^2|jm\rangle = 0$ , т. е. наш матричный элемент может быть отличен от нуля лишь при  $j' = j$ . Наконец, рассматривая матричные элементы от операторных равенств типа  $\hat{j}_-\hat{S}\hat{j}_+ = \hat{S}\hat{j}_-\hat{j}_+$ , получим, что обсуждаемый матричный элемент вообще не зависит от  $m$ . В итоге

$$\langle j'm'|\hat{S}|jm\rangle = a(j) \cdot \delta_{jj'} \cdot \delta_{mm'}. \quad (12.13)$$

Если состояния имеют определённые чётности, то для скалярного оператора  $\hat{S}$  справа добавляется множитель  $\delta_{P',P}$ , а для псевдоскалярного — множитель  $\delta_{P',-P}$ .

• **Векторный оператор.** Перепишем перестановочные соотношения для компонент *векторного* оператора  $\hat{V}$  и момента импульса (8.6):

$$[\hat{j}_z, \hat{V}_z] = 0, \quad [\hat{j}_+, \hat{V}_+] = 0, \quad [\hat{j}_-, \hat{V}_-] = 0 \quad (\text{при } \hat{V}_\pm = \hat{V}_x \pm i\hat{V}_y).$$

Как и для скалярного оператора, отсюда следует

$$\langle j', m' | [\hat{j}_z, \hat{V}_z] | j, m \rangle = 0 = (m - m') \langle j', m' | \hat{V}_z | j, m \rangle.$$

Итак, матричный элемент  $\langle j', m' | \hat{V}_z | j, m \rangle$  может отличаться от нуля только при  $m' = m$ . Точно так же матричные элементы  $\langle j', m' | \hat{V}_+ | j, m \rangle$  и  $\langle j', m' | \hat{V}_- | j, m \rangle$  могут отличаться от нуля только если  $m' = m + 1$  или  $m' = m - 1$ . Для операторов  $\hat{V}_x$  и  $\hat{V}_y$  это означает, что от нуля отличны только матричные элементы с  $m' = m \pm 1$ .

Для получения правил отбора по  $j$  мы воспользуемся интерпретацией задачи сложения моментов как проблемы разбиения произведения представлений группы вращений на неприводимые представления (конец предыдущего раздела). С этой точки зрения векторный оператор  $\hat{V}$  реализует трёхмерное представление группы вращений, а векторы состояния  $|j, m\rangle - (2j + 1)$ -мерное. Вектор состояния  $\hat{V}|j, m\rangle$  реализует произведение этих представлений. Оно разбивается на сумму  $2K + 1$ -мерных представлений с  $K = j + 1, j, j - 1$  (при  $j = 0$  остаётся только  $K = 1$ ). Скалярная величина  $\langle j', m' | \hat{V} | j, m \rangle$  может отличаться от нуля, только если размерность представления бра-вектора  $\langle j', m' |$  совпадает с размерностью одного из представлений, на которые разбивается  $\hat{V}|j, m\rangle$ , т. е. при  $j' = j \pm 1$  или  $j$  (если  $j \neq 0$ ). Итак, для любого *векторного оператора*  $\hat{V}$  выполняются *правила отбора*:

$$\begin{aligned} \langle j' m' | \hat{V}_i | j m \rangle &\neq 0 \text{ лишь при } j' = j, j \pm 1, \\ \langle j' m' | \hat{V}_z | j m \rangle &\neq 0 \text{ лишь при } m' = m, \\ \langle j' m' | \hat{V}_{x,y} | j m \rangle &\neq 0 \text{ лишь при } m' = m \pm 1, \\ \langle 00 | V_i | 00 \rangle &= 0. \end{aligned} \tag{12.14}$$

• **Тензорные операторы.** Подобным образом строятся и правила отбора для тензорных операторов. Так, матричные элементы тензора второго ранга могут быть ненулевыми только при

$$\text{Тензор 2 ранга : } |j - j'| = 0, 1, 2; \quad |m - m'| = 0, 1, 2. \tag{12.15}$$

• *Правила отбора по чётности.* Напомним, что есть два типа векторов. Компоненты обычных (полярных) векторов  $\mathbf{V}$  меняют знак при отражении координат (смещение, импульс, электрический дипольный момент, электрическое поле). Компоненты аксиального вектора  $\mathbf{A}$  (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 чётностях состояний  $|n\rangle$  и  $|m\rangle$ . Точно так же матричные элементы  $\langle n|\hat{A}_i|m\rangle$  отличны от нуля только при совпадающих чётностях состояний  $|n\rangle$  и  $|m\rangle$ .

**Ещё одна интерпретация правил отбора.**

В соответствии с изложенным на стр. 211, набор волновых функций  $\psi_{j,m}$  образует неприводимый тензор  $j$ -го ранга, а матричный элемент  $\langle j'm'|\hat{V}|jm\rangle$  есть свёртка сопряжённого тензора  $\psi_{j',m'}^*$ , тензора  $k$ -го ранга  $V$  и тензора  $\psi_{j,m}^*$  (интеграл по соответствующим угловым переменным). Замены переменных под интегралом, отвечающие вращениям координатных осей не могут менять этот матричный элемент. Это возможно только если изучаемая свёртка есть скаляр. В свою очередь это означает, что функция  $\hat{V}\psi_{j,m}$  при вращениях координатного базиса преобразуется как произведение тензоров ранга  $j$  и ранга  $k$ , т. е. как объект, получающийся при сложении моментов  $j$  и  $k$ . Наш матричный элемент не меняется при этой замене переменных только если функция  $\psi_{j',m'}$  — одна из набора, получающегося при сложении этих моментов. В частности, если  $\hat{V}$  — векторный оператор, то должно быть  $j' = j \pm 1$  или  $j' = j$ , и если  $\hat{V}$  — тензор второго ранга, то должно быть  $j' = j \pm 2$  или  $j' = j \pm 1$  или  $j' = j$ .

**12.2.2. Усреднение векторного оператора**

Используя соотношения (8.3), можно убедиться, что

$$\begin{aligned} [\hat{j}^2, \hat{V}_i] &= -ie_{ijk}(\hat{j}_j\hat{V}_k + \hat{V}_k\hat{j}_j); \\ [\hat{j}^2, [\hat{j}^2, \hat{V}_i]] &= 2(\hat{j}^2\hat{V}_i + \hat{V}_i\hat{j}^2) - 4\hat{j}_i(\hat{j}\hat{V}). \end{aligned} \tag{12.16}$$

Взяв от этого соотношения матричный элемент по состояниям  $|jm\rangle$  и  $|jm'\rangle$ , т. е. записав  $\langle j, m| [\hat{j}^2, [\hat{j}^2, \hat{V}]] |jm'\rangle = 0$ , получим формулу

усреднения:

$$\langle jm' | \hat{V}_i | jm \rangle = \langle jm' | \hat{j}_i | jm \rangle \frac{\langle jm | (\hat{\mathbf{j}} \hat{\mathbf{V}}) | jm \rangle}{j(j+1)}. \quad (12.17)$$

Поскольку матричный элемент *скаляра*  $\langle jm | (\hat{\mathbf{j}} \hat{\mathbf{V}}) | jm \rangle$  не зависит от проекции полного момента на ось  $z$ , это означает, что усреднённый вектор  $\mathbf{V}$  направлен по усреднённому вектору  $\hat{\mathbf{j}}$ .

Соотношение (12.17) составляет содержание *векторной модели* для векторного оператора. Оно используется, в частности, для изучения расщепления уровней в магнитном поле (разд. 15.1.7). (Это соотношение представляет собой частный случай теоремы Вигнера–Эккарта). Подобные соотношения выписываются и для матричных элементов тензора произвольного ранга — см. [1]).

### § 12.3. Задачи

1. Найти собственные значения оператора  $(\hat{s}_1 \hat{s}_2)$ .
2. Пусть две спиновые частицы взаимодействуют по закону  $V = g(\hat{s}_1 \hat{s}_2)$  и в начальный момент времени спин первой частицы направлен вдоль оси  $z$ , а второй — вдоль  $\mathbf{n} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta)$ . Найти среднее значение  $\langle s_1 \rangle$  в зависимости от времени.
3. В задаче о сложении моментов  $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{j}}_1 + \hat{\mathbf{j}}_2$  используем векторы состояний  $|I\rangle \equiv |j_1, m_1\rangle_1 |j_2, m_2\rangle_2$  и  $|II\rangle \equiv |j, m\rangle_{sum}$ , см. стр. 269. Вычислить  $\langle I | (\hat{\mathbf{j}}_1 \hat{\mathbf{j}}_2) | I \rangle$ ,  $\langle II | (\hat{\mathbf{j}}_1 \hat{\mathbf{j}}_2) | II \rangle$ . Получить *правило сумм* для коэффициентов Клебша–Гордана (суммирование по всем  $m_1$  и  $m_2$ , дающим  $m = m_1 + m_2$ )

$$\sum (C_{j_1 m_1, j_2 m_2}^{j m})^2 2m_1 m_2 = j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1). \quad (12.18)$$

4. Покажите, что при сложении двух одинаковых моментов  $j_2 = j_1$  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.
5. Найти собственные функции при сложении моментов а)  $j_1 = 1$  и  $j_2 = 2$ , б)  $j_1 = \frac{3}{2}$  и  $j_2 = 2$ . Получите (12.7), (12.8).

6. 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.
7. Покажите, что для пары электронов 1 и 2 оператор  $\hat{P} = (1 + \hat{\sigma}_1 \hat{\sigma}_2)/2$  — оператор спинового обмена, т. е. его собственные значения в состояниях с полным спином 0 и 1 есть  $\pm 1$ .
8. Пусть  $\hat{j} = \hat{j}_1 + \hat{j}_2$ . Покажите, что оператор

$$\hat{\mathcal{P}}_{j_0} = \prod_{j_i=|j_1-j_2|, j_i \neq j_0}^{j_1+j_2} \frac{\hat{j}^2 - j_i(j_i+1)}{j_0(j_0+1) - j_i(j_i+1)}$$

есть оператор проектирования на состояния с  $j = j_0$ .

9. Получите соотношения (12.16).
10. Показать, что для цепочки спинов с гамильтонианом  $\hat{H} = -J \sum_{n,\delta} \mathbf{s}_n \mathbf{s}_{n+\delta} - 2\mu\mathcal{B} \cdot S_z$  и полным спином  $\mathbf{S} = \sum_n \mathbf{s}_n$  операторы  $\hat{H}$  и  $\hat{\mathbf{S}}^2$  коммутируют.
11. Для системы с гамильтонианом  $\hat{H} = \lambda(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_1 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_3)$  (три частицы со спином  $\frac{1}{2}$ ) найти уровни энергии и кратности вырождения для состояний с суммарным спином  $S = \frac{3}{2}$  и с  $S = \frac{1}{2}$ . Найти собственные состояния  $|\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_z\rangle$ .
12. Пусть  $\mathbf{a}$  — постоянный вектор, а  $\chi$  — постоянный спинор. Показать, что  $\psi_1 = R(\mathbf{r})(\sigma \mathbf{r})\chi$  описывает состояние  $|\ell = 1, j = \frac{1}{2}\rangle$ , а  $\psi_2 = R(\mathbf{r})\{\sigma \cdot [\mathbf{a} \times \mathbf{r}] - 2i(\mathbf{a}\sigma)\}\chi$  — состояние  $|\ell = 1, j = \frac{3}{2}\rangle$ .

## Глава 13

### Тождественность частиц

В этой главе координатой  $q$  частицы называется набор из её пространственных  $\mathbf{r}$  и спиновых  $s_z$  координат.

#### § 13.1. Волновая функция системы тождественных частиц

В классической механике одинаковые частицы считаются различными (как будто у каждой на боку можно поставить метку — номер). В частности, для пары классических частиц распределение вероятностей  $\rho_{12}(x_1, p_1; x_2, p_2)$  в отсутствие взаимодействия между ними сводится к произведению индивидуальных распределений

$$\rho_{12}(x_1, p_1; x_2, p_2) = \rho_1(x_1, p_1)\rho_2(x_2, p_2).$$

Естественно ожидать, в силу соображений соответствия, что в квантовой механике подобное соотношение должно выполняться в отсутствие взаимодействия для волновых функций,  $\psi_{12}(x_1, x_2) = \psi_1(x_1)\psi_2(x_2)$ .

В действительности, волновая функция системы частиц, вообще говоря, не сводится к произведению волновых функций отдельных частиц, даже в отсутствие взаимодействия между ними. В силу принципа неопределённости, 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:

$$\boxed{\text{частицы одного сорта различить невозможно.}} \quad (13.1)$$

Поэтому волновая функция пары частиц  $\psi(q_1, q_2)$  при замене  $q_1$  на  $q_2$  определяет состояние с той же самой плотностью вероятности, т. е.  $|\psi(q_2, q_1)|^2 = |\psi(q_1, q_2)|^2$ .

Определим оператор перестановки тождественных частиц  $\hat{\mathbb{P}}_{12}$ :

$$\hat{\mathbb{P}}_{12}\psi(q_1, q_2) = \psi(q_2, q_1). \quad (13.2)$$

Поскольку  $|\psi(q_2, q_1)|^2 = |\psi(q_1, q_2)|^2$ , то  $\psi(q_2, q_1) = e^{i\alpha}\psi(q_1, q_2)$ . Это значит, что собственное значение  $P_{12}$  оператора  $\hat{\mathbb{P}}_{12}$  есть  $e^{i\alpha}$ . Но повторное действие оператора перестановки сводится к тождественному преобразованию. Поэтому есть всего две возможности,  $P_{12} = 1$  или  $P_{12} = -1$ , волновая функция пары тождественных частиц либо симметрична, либо антисимметрична при их перестановке:

$$\psi(q_2, q_1) = \psi(q_1, q_2) \quad \text{или} \quad \psi(q_2, q_1) = -\psi(q_1, q_2). \quad (13.3)$$

◇ Если волновая функция при перестановке частиц *не меняется*, говорят, что частицы подчиняются *статистике Бозе–Эйнштейна*, их называют **бозонами**.

◇ Если волновая функция *меняет знак* при перестановке частиц, говорят, что частицы подчиняются *статистике Ферми–Дирака*, их называют **фермионами**.

В. Паули показал, что все частицы с полуцелым спином (электроны, протоны, кварки, ядра трития, ...) — фермионы, а все частицы с целым спином (фотоны,  $\alpha$ -частицы, дейтоны, ...) — бозоны.

• Полезно обсудить возможные значения полного момента импульса пары тождественных частиц с полным моментом  $j$ .

Напомним, что при сложении двух одинаковых моментов  $j_2 = j_1$  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 (задача 13.4). Состояния пары Бозе-частиц симметричны, для них  $j_1 = j_2$  — целое. Поэтому полный момент этой пары  $j$  может принимать только чётные значения  $2j_1, 2j_1 - 2, \dots$ . В свою очередь состояния пары Ферми-частиц антисимметричны, для них  $j_1 = j_2 = \tilde{j}$  — полуцелое, т. е.  $2\tilde{j}$  — нечётное число. Поэтому полный момент этой пары  $j$  может принимать только чётные значения  $2\tilde{j} - 1, 2\tilde{j} - 3, \dots$ . Окончательно мы приходим к выводу.

Полный момент пары тождественных частиц — чётное число.

(13.4)

• Волновую функцию пары невзаимодействующих нетождественных частиц можно записать в виде произведения волновых функций

отдельных частиц,  $\psi(q_1, q_2) = \psi_1(q_1)\psi_2(q_2)$ . Если частицы тождественны, то в силу (13.3) взамен этого

$$\psi(q_1, q_2) = \frac{\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) \pm \psi_1(q_2)\psi_2(q_1)}{\sqrt{2}} \quad \left( \begin{array}{l} (+) - \text{ бозоны,} \\ (-) - \text{ фермионы.} \end{array} \right) \quad (13.5a)$$

Соответственно, для  $N$  тождественных фермионов

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(q_1) & \psi_2(q_1) & \dots & \psi_N(q_1) \\ \psi_1(q_2) & \psi_2(q_2) & \dots & \psi_N(q_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_1(q_N) & \psi_2(q_N) & \dots & \psi_N(q_N) \end{vmatrix}. \quad (13.5b)$$

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.*

(13.5c)

◇ Для  $N$  тождественных бозонов волновая функция образуется по тому же типу, но, в отличие от детерминанта (13.5b), куда отдельные слагаемые входят с разными знаками, для бозонов все слагаемые суммы входят со знаком *плюс*. В частности, для пары бозонов, находящихся в одинаковом квантовом состоянии  $\psi(q_1, q_2) = \psi_1(q_1)\psi_1(q_2)$ .

• В отсутствие магнитного поля волновая функция разбивается в произведение координатной и спиновой волновой функций,  $\psi(q) = \psi(\mathbf{r})\chi(s_z)$ . Если гамильтониан системы не зависит от  $s_z$ , *удобно* использовать симметричные и антисимметричные комбинации пространственных и спиновых функций

$$\begin{aligned} \psi_{\pm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) \pm \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)}{\sqrt{2}}; \\ \chi_{\mp}(s_{z1}, s_{z2}) &= \frac{\chi_1(s_{z1})\chi_2(s_{z2}) \mp \chi_1(s_{z2})\chi_2(s_{z1})}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (13.6)$$

Волновую функцию пары тождественных фермионов можно записать в виде  $\psi = A\psi_+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_-(s_{z1}, s_{z2}) + B\psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_+(s_{z1}, s_{z2})$ . При  $A = 0$  спиновая волновая функция симметрична, и полный спин равен 1, при этом пространственная волновая функция антисимметрична. При  $B = 0$  спиновая волновая функция антисимметрична, при этом

полный спин равен 0, а пространственная волновая функция симметрична.

Волновую функцию пары тождественных бозонов можно записать в виде другой суперпозиции сходных по виду базисных функций,

$$\psi = A\psi_+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_+(s_{z1}, s_{z2}) + B\psi_-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_-(s_{z1}, s_{z2}).$$

В итоге (сравните нижеследующее утверждение с (13.4)),

*Пространственная волновая функция относительного движения симметрична относительно перестановки частиц, если суммарный спин системы чётный, пространственная волновая функция относительного движения антисимметрична относительно перестановки частиц, если суммарный спин системы нечётный.* (13.7)

## § 13.2. Обменное взаимодействие

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  $\hat{P}$  (13.2).

В такой системе энергия состояния зависит от полного спина системы. Происхождение этой зависимости легко понять на примере системы из двух электронов. Антисимметричное спиновое состояние (спины антипараллельны — суммарный спин равен нулю) отвечает симметричной пространственной волновой функции, а симметричное спиновое состояние (спины параллельны — суммарный спин равен единице) отвечает антисимметричной пространственной волновой функции. В первом случае электроны оказываются в среднем ближе друг к другу, чем во втором. Поэтому энергия кулоновского отталкивания в первом случае больше, чем во втором — дело выглядит так, что энергия состояния зависит от полного спина. Это специфически квантовое явление называют **обменным взаимодействием**.

Рассмотрим энергию пары электронов, считая их взаимодействие  $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$  возмущением. Состояниям пары электронов с полным спином  $s = 0$  (спины электронов антипараллельны, знак «+») или 1 (спины электронов параллельны, знак «-») отвечают пространственные

волновые функции

$$\Psi_{\pm}(1, 2) = \frac{\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) \pm \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)}{\sqrt{2}}. \quad (13.8)$$

В этих состояниях энергия взаимодействия электронов есть

$$\begin{aligned} \langle U \rangle_{\pm} &= \iint \Psi_{\pm}^* U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \Psi_{\pm} d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 = \begin{cases} A + J & (s = 0), \\ A - J & (s = 1), \end{cases} \\ A &= \iint d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 U_{12} |\psi_1(\mathbf{r}_1)|^2 |\psi_2(\mathbf{r}_2)|^2, \\ J &= \iint d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 U_{12} \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2^*(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) \psi_1^*(\mathbf{r}_2). \end{aligned} \quad (13.9)$$

Чтобы получить другую форму равенства (13.9), запишем выражение для квадрата вектора<sup>1</sup>  $\hat{\mathbf{s}}$ , равного сумме векторов спина двух электронов  $\hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2$ ,

$$\hat{\mathbf{s}}^2 = \hat{\mathbf{s}}_1^2 + \hat{\mathbf{s}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2 = 3/2 + 2(\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2)$$

(напомним, что  $\hat{\mathbf{s}}_1^2 = \hat{\mathbf{s}}_2^2 = 1/2(1 + 1/2) = 3/4$ ).

В состоянии с полным спином 1 правая часть равна 2, а в состоянии с полным спином 0 правая часть равна 0. Поэтому можно записать

$$\frac{1}{2} + 2\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2 = \begin{cases} 1 & \text{при } s = 1, \\ -1 & \text{при } s = 0. \end{cases}$$

Подставляя это равенство в (13.9), найдем удобную для дальнейших обсуждений форму этого выражения

$$\langle U \rangle = \tilde{A} - 2J\hat{\mathbf{s}}_1\hat{\mathbf{s}}_2, \quad (\tilde{A} = A - J/2). \quad (13.10)$$

Величину  $J$  называют *обменным интегралом (обменной энергией)*. Эта энергия 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).

<sup>1</sup>Мы не различаем здесь слов «оператор» и «собственное значение оператора».

Именно такое — *обменное* — взаимодействие ответственно за ферромагнетизм кристаллов, которое представляет собой упорядочение спинов (т. е. и магнитных моментов) атомов кристалла<sup>1</sup>. Действительно, соотношение (13.9) 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.

### § 13.3. Параводород и ортоводород

Сходное влияние симметрии спинового состояния на полную энергию системы прослеживается в описании молекулы водорода  $H_2$ . Помимо электронов, эта молекула содержит две тождественных частицы — протона со спином  $1/2$ . Из-за большой разницы масс электрона и протона здесь хорошо работает адиабатическое приближение (Борна–Оппенгеймера), в котором быстрые движения электронов рассматриваются при фиксированных положениях протонов, а более медленные движения протонов — в самосогласованном поле, включающем их кулоновское отталкивание и усреднённое притяжение через электроны. Отметим ещё, что нашу молекулу можно представить в виде гантели с моментом инерции  $I = 2m_p a^2$ . Энергия её вращательного уровня с моментом импульса  $\ell$  составляет  $w_\ell = \hbar^2 \ell(\ell + 1)/(2I)$ . В силу принципа Паули полная протонная волновая функция молекулы  $H_2$  антисимметрична. Эта волновая функция является произведением спиновой и пространственной функций.

Если спиновая волновая функция антисимметрична (спины ядер антипараллельны), полный спин пары протонов  $s$  равен нулю. При этом пространственная волновая функция симметрична, т. е. содержит состояния лишь с чётными значениями момента импульса

<sup>1</sup>В реальных веществах, обнаруживающих магнитные свойства, прямо вычисленный обменная энергия обычно невелика, т.к. расстояние между разными ионами сравнительно велико. Основную роль играет *косвенный обмен* — эффект второго порядка теории возмущений, состоящий в обмене одного из  $3d$  или  $4f$  электронов решётки с электроном проводимости и последующем обмене этого электрона проводимости с другим  $3d$  или  $4f$  электроном решётки.

$\ell = 0, 2, 4, \dots$  Молекулу в таком состоянии называют *параводородом*. В основном состоянии  $\ell = 0$ , вращательный уровень параводорода не возбуждается ( $w_0 = 0$ ).

Если спиновая волновая функция симметрична (спины ядер параллельны), полный спин пары протонов  $s$  равен единице. При этом пространственная волновая функция антисимметрична, т. е. содержит состояния лишь с нечётными значениями момента импульса  $\ell = 1, 3, 5, \dots$  Молекулу в таком состоянии называют *ортоводородом*. В основном состоянии  $\ell = 1$ , энергия вращательного движения ортоводорода составляет  $w_1 = \hbar^2/I = 7,3 \cdot 10^{-3}$  эВ  $\approx 85^\circ$  К.

Поэтому при температуре ниже  $20^\circ$  К за счёт теплового движения и соударений весь водород находится в состоянии параводорода, а при комнатной и более высокой температуре отношение количества ортоводорода и параводорода равно отношению кратностей их спинового вырождения ( $2s + 1$ ), т. е.  $3 : 1$ . Всё это хорошо проверено на опыте.

Разумеется, состояния орто- и параводорода различаются ещё и энергией взаимодействия магнитных ядерных диполей, но эта энергия ничтожно мала,  $\sim 10^{-9}$  эВ.

Подчеркнём, что рассмотренная картина целиком связана с тождественностью частиц и значением их спина. Поэтому ничего подобного не будет наблюдаться в молекулах  $HD$ ,  $DD$  и  $HT$ , где  $D = {}^2H$  — дейтерий — изотоп водорода с атомным весом 2 и спином 0, а  $T = {}^3H$  — тритий — изотоп водорода с атомным весом 3 и спином  $1/2$ . Для молекулы  $TT$  эта картина воспроизводится, но энергия вращательного движения ортотрития втрое меньше, чем для ортоводорода. Для более тяжёлых молекул со спином  $1/2$ , например,  $Cl_2$  энергия вращательного движения ортохлора в 35 раз меньше, чем для ортоводорода, т. е. интересные явления могут наблюдаться только при температурах не выше  $1^\circ$  К.

### § 13.4. Задачи

1. Найти спектр энергий и кратности вырождения относительного движения 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  $1$ .
2. Докажите (13.7).
  3. Два тождественных фермиона помещены в поле  $\sum_i kx_i^2/2$  и взаимодействуют по закону  $-kx_1x_2$ . В первом порядке теории возмущений найти поправки к четырём низшим уровням в состояниях с различным полным спином и соответствующие кратности вырождения. Сравнить с точным решением.
  4. Два фермиона помещены в поле  $\sum_i kx_i^2/2$  и взаимодействуют по закону  $V = \lambda(\sigma_1\sigma_2)$ . В первом порядке теории возмущений найти поправки к четырём низшим уровням в состояниях с различным полным спином и соответствующие кратности вырождения.
  5. Две частицы в параллелепипеде с ребрами  $a, b, c$  взаимодействуют по закону  $U = U_0\delta(\bar{r}_1 - \bar{r}_2)$ . 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  $1/2$
    - 4) тождественными со спином  $1$ .
 В случаях 2–4 определить вероятность того, что обе частицы находятся в левой половине объёма при заданном полном спине  $S$ .
  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 14

# Вторичное квантование

### § 14.1. 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 твёрдого тела.

В гл. 1 мы ввели понятие *пространства состояний квантовой системы* для одной частицы, использовали ортонормированный базис в этом пространстве, который образует *полную систему функций*, и обсуждали правила перехода от одного такого базиса к другому. Примерами были набор плоских волн и набор собственных функций какого-нибудь эрмитова оператора, например, гамильтониана.

При переходе к многочастичным системам полное пространство состояний расслаивается на пространства — слои, отвечающие различным числам тождественных частиц (одноэлектронное, двухэлектронное с одним фотоном и т. п.). В каждом из этих слоёв базис образуют произведения базисных функций одночастичного слоя, должным образом (с учётом тождественности) симметризованные (*В. А. Фок*). Пространство состояний оказывается прямым произведением пространств одночастичных состояний, с учётом тождественности частиц. Обычно в этот набор состояний включают и все состояния, которые в отсутствие внешних воздействий могут существовать неограниченно долго, т. е. например, помимо электронов и протонов, в этом наборе учитываются и атомы водорода во всех возможных состояниях<sup>1</sup>.

---

<sup>1</sup>Важным вариантом является использование в качестве такого базиса набора состояний системы при  $t \rightarrow -\infty$  или  $t \rightarrow \infty$  — *асимптотических состояний*. Полагают, что в эти моменты отдельные частицы разошлись так далеко, что взаимодействием между ними можно пренебречь и что, к тому же, выключены взаимодействия, приводящие к спонтанным переходам.

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 определённости 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  $1, 2, \dots$  (Обычно имеют в виду систему в конечном объёме. 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 учёте 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 можно рассматривать как состояние с  $n$  вибронами, которое получается из основного  $n$ -кратным действием оператора рождения  $\hat{a}^+$  на основное состояние  $|0\rangle$ . Простейший пример такого рода был фактически развит в применении к линейным цепочкам в § 7.8.

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):

$$\begin{aligned}\hat{a}_i|N_1, N_2, \dots, N_i=n, \dots\rangle &= \sqrt{n}|N_1, N_2, \dots, N_i=n-1, \dots\rangle, \\ \hat{a}_i^+|N_1, N_2, N_i=n, \dots\rangle &= \sqrt{n+1}|N_1, N_2, \dots, N_i=n+1, \dots\rangle.\end{aligned}\quad (14.1)$$

В частности, любое состояние можно получить действием необходимого числа операторов рождения на основное состояние  $|0\rangle$  (состояние, в котором нет частиц):

$$|N_1, \dots, N_k, \dots\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_1! \dots N_k! \dots}} (\hat{a}_1^+)^{N_1} \dots (\hat{a}_k^+)^{N_k} \dots |0\rangle. \quad (14.2)$$

Переход одной частицы из состояния « $a$ » в состояние « $b$ » описывается оператором  $\hat{a}_b^+ \hat{a}_a$ :

$$\begin{aligned}\hat{a}_b^+ \hat{a}_a | \dots, N_a = n_a, \dots, N_b = n_b, \dots \rangle &= \\ = \sqrt{(n_b + 1) n_a} | \dots, N_a = n_a - 1, \dots, N_b = n_b + 1, \dots \rangle.\end{aligned}$$

По определению, операторы рождения и уничтожения, действующие на разные состояния, коммутируют друг с другом. Поэтому имеют место естественные обобщения перестановочных соотношений (4.4)

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_k^+] = \delta_{ik}, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_k] = 0, \quad [\hat{a}_i^+, \hat{a}_k^+] = 0. \quad (14.3)$$

Для фермионов числа заполнения  $N_i$  могут принимать только значения 0 и 1, и соответствующие операторы рождения и уничтожения антикоммутируют (*это обеспечивает выполнение принципа Паули*), т. е.

$$\hat{a}_i \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_i = \delta_{ik}, \quad \hat{a}_i \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_i^+ = 0. \quad (14.4)$$

◇ Далее часто переходят к операторам  $\hat{\psi}$  в  $q$ -представлении (ср. (1.18)):

$$\hat{\psi}(q) = \sum_i \hat{a}_i \langle q|i \rangle, \quad \hat{\psi}^+(q) = \sum_i \langle i|q \rangle \hat{a}_i^+. \quad (14.5)$$

Эти соотношения выглядят как разложение волновой функции по базису  $\langle q|i \rangle$ , коэффициенты которого  $\hat{a}$  стали операторами.

Если базис  $\langle q|i \rangle$  — ортонормированный, то перестановочные соотношения (14.3) принимают вид

$$[\hat{\psi}(q), \hat{\psi}(q')] = 0, \quad [\hat{\psi}(q), \hat{\psi}^+(q')] = \delta(q - q'). \quad (14.6)$$

Разумеется, подобные операторы должны быть введены для каждого сорта встречающихся частиц. Как отмечено выше, для фермионов и бозонов алгебры немного различаются.

## § 14.2. Квантование электромагнитного поля

Важное применение развитой выше схемы доставляет случай электромагнитного поля. Мы представим поле как сумму внешнего поля, задаваемого макроскопическими источниками, и поля излучения, зависящего от координат и времени, например,

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}^{\text{ex}} + \mathbf{E}^{\text{rad}} \quad \text{при} \quad \langle \mathbf{E}^{\text{rad}} \rangle = 0.$$

Поскольку уравнения электродинамики (уравнения Максвелла) линейны, можно отдельно изучать эти уравнения для внешнего поля и для поля излучения. При этом после усреднения по объёму 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 выписывая более значка <sup>rad</sup>.

Прежде чем выполнять квантование, мы опишем кратко неквантованное внешнее поле (см. курс электродинамики, например, [21]).

### 14.2.1. 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

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \cos(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \phi), \quad \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{B}_0 \cos(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \phi). \quad (14.7a)$$

В курсе электродинамики взамен этого поля изучают *нефизический объект* — комплексное поле

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^{ED}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_0^{ED} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \phi)}, & \mathbf{E} &= \text{Re } \mathbf{E}^{ED}, \\ \mathbf{B}^{ED}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{B}_0^{ED} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \phi)}, & \mathbf{B} &= \text{Re } \mathbf{B}^{ED}. \end{aligned} \quad (14.7b)$$

Для этих комплексных полей  $\mathbf{E}^{ED}$ ,  $\mathbf{B}^{ED}$  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 квантовой механике исходным является преобразование Фурье

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{E}_0^{QM} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \phi)} + \mathbf{E}_0^{*QM} e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \phi)}, \\ \mathbf{B}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{B}_0^{QM} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \phi)} + \mathbf{B}_0^{*QM} e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \phi)}.\end{aligned}\quad (14.7c)$$

Видно, что введённые таким способом амплитуды различаются вдвое.

$$\mathbf{E}_0^{ED} = 2\mathbf{E}_0^{QM}, \quad \mathbf{B}_0^{ED} = 2\mathbf{B}_0^{QM}. \quad (14.7d)$$

В большинстве вычислений достаточно следить за положительно-частотной частью  $\mathbf{E}_0^{QM} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \phi)}$ . Для неё 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

$$[\mathbf{k} \times \mathbf{B}] = (\omega/c)\mathbf{E}, \quad [\mathbf{k} \times \mathbf{E}] = -(\omega/c)\mathbf{B}.$$

Однако, в силу (14.7d) некоторые из получающихся ответов по форме отличаются от привычных в электродинамике множителем 2 или 4. Например, для монохроматической волны усреднённые по времени вектор потока энергии  $\mathbf{S}$  (вектор Пойнтинга) и плотность энергии поля имеют вид

$$\mathbf{S} = \frac{c}{4\pi} [\mathbf{E} \times \mathbf{B}] = c \frac{\mathbf{k}}{k} w_0, \quad w_0 = \frac{1}{8\pi} |\mathbf{E}_0^{ED}|^2 \equiv \frac{c}{2\pi} \frac{\mathbf{k}}{k} |\mathbf{E}_0^{QM}|^2. \quad (14.8)$$

• Описание электромагнитного поля с помощью шести компонент электрического и магнитного полей (как в начале, на стр. 20 и далее) избыточно. Как известно, его можно заменить описанием с помощью четырёхмерного вектора-потенциала  $A^\mu$ , через который электрическое и магнитное поля выражаются соотношениями

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \partial\mathbf{A}/(c\partial t), \quad \mathbf{B} = [\nabla \times \mathbf{A}], \quad (14.9)$$

и который в случае плоской волны имеет Фурье-разложение

$$A^\mu(\mathbf{r}, t) = A_0^{\mu QM} e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \phi)} + A_0^{\mu*QM} e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \phi)}. \quad (14.10)$$

Далее мы используем разложение Фурье (14.7c), опуская значок  $^{QM}$ .

◇ Однако вектор–потенциал — релятивистский вектор с четырьмя компонентами, а электромагнитная волна в вакууме имеет лишь две независимых поляризации. Значит, избыточным является и такое описание, надо избавиться ещё 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 § 11.3. Для более удобного решения различных возникающих задач можно по–разному распоряжаться этой неоднозначностью. В частности, дальнейшее описание **удобно** вести в *кулоновской калибровке* (11.11), где скалярный потенциал  $\phi = 0$  и  $\nabla \mathbf{A} = 0$ . При этом векторный потенциал удовлетворяет волновому уравнению

$$(1/c^2)\partial^2 \mathbf{A}/\partial t^2 - \Delta \mathbf{A} = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{A} = 0. \quad (14.11)$$

• В кулоновской калибровке (11.11) связь положительно–частотных амплитуд полей с положительно–частотными амплитудами вектор–потенциала и следствия из уравнений Максвелла для полей записываются в виде хорошо известного набора соотношений

$$\mathbf{E} = i\omega \mathbf{A}/c, \quad \mathbf{B} = i[\mathbf{k} \times \mathbf{A}], \quad \omega^2 = c^2 \mathbf{k}^2, \quad (\mathbf{k} \mathbf{A}) = 0. \quad (14.12)$$

Последнее соотношение отвечает условию кулоновской калибровки, оно описывает тот факт, что вектор  $\mathbf{A}$  ортогонален вектору  $\mathbf{k}$ , т. е. имеет лишь две независимых компоненты (две поляризации).

Пару векторов поляризации  $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}, \lambda)$  ( $\lambda = 1, 2$ ) выбирают обычно так, что они образуют базис в плоскости, ортогональной вектору  $\mathbf{k}$ , т. е. удовлетворяют условиям поперечности, ортогональности и полноты,

$$\begin{aligned} (\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}, \lambda)) &= 0, \quad (\boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, \lambda) \cdot \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}, \lambda')) = \delta_{\lambda\lambda'}, \\ \sum_{\lambda} \boldsymbol{\varepsilon}_i^*(\mathbf{k}, \lambda) \boldsymbol{\varepsilon}_j(\mathbf{k}, \lambda) &= \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{\mathbf{k}^2}. \end{aligned} \quad (14.13)$$

В частности для волны, для которой  $\mathbf{k} = (0, 0, k)$ , базис линейных поляризаций имеет вид  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}1}^{\ell} = (1, 0, 0)$ ,  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}2}^{\ell} = (0, 1, 0)$ , а базис циркулярных поляризаций имеет вид  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\pm}^r = (\mp 1, i, 0)/\sqrt{2}$ .

Окончательно, Фурье–разложение векторного потенциала прини-

мает вид

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \left[ \mathbf{A}(\mathbf{k}, \lambda) e^{-i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} + \mathbf{A}^*(\mathbf{k}, \lambda) e^{i(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})} \right], \quad (14.14)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}, \lambda) = A(\mathbf{k}, \lambda) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}, \lambda).$$

### 14.2.2. Электромагнитное поле в кубической полости. Осцилляторы поля

Рассмотрим электромагнитное поле внутри кубической полости 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 этих волн выполняется условие ортогональности  $\int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} d^3r = L^3 \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$ .

Энергию поля  $H^E = L^3(\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2)/(8\pi)$  для каждой моды колебаний (компоненты Фурье с заданным волновым вектором и поляризацией) можно записать с помощью (14.9), (14.12) в виде<sup>1</sup>

$$H^E(\mathbf{k}, \lambda, t) = \frac{L^3}{4\pi} \left( \frac{1}{c^2} \frac{\partial A(\mathbf{k}, \lambda, t)}{\partial t} \frac{\partial A^*(\mathbf{k}, \lambda, t)}{\partial t} + \right. \quad (14.15)$$

$$\left. + \mathbf{k}^2 A(\mathbf{k}, \lambda, t) A^*(\mathbf{k}, \lambda, t) \right) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}, \lambda) \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, \lambda).$$

Таким образом, поле в полости выглядит как набор независимых гармонических осцилляторов — *осцилляторов поля* с частотой  $\omega = ck$  — по два для каждого  $\mathbf{k}$ . Величина  $A(\mathbf{k}, \lambda, t)$  играет роль обобщённой координаты, соответствующая скорость есть  $\partial A(\mathbf{k}, \lambda, t)/\partial t$  и «масса» —  $L^3/(4\pi c^2)$ . Величина  $P(\mathbf{k}, \lambda, t) \equiv (L^3/(4\pi c^2)) \partial A(\mathbf{k}, \lambda, t)/\partial t$  есть обобщённый импульс, канонически сопряжённый нашей обобщённой координате.

### 14.2.3. Квантование поля

В соответствии с обсуждением на стр. 37, процедура квантования поля сводится теперь к следующим действиям.

Сначала полученные обобщённые координаты и импульсы становятся операторами с обычными перестановочными соотношениями между ними. Вслед за тем вводятся операторы рождения и уничтожения  $\hat{a}^+(\mathbf{k}, \lambda)$  и  $\hat{a}(\mathbf{k}, \lambda)$  по образцу § 4.1 (величина, подобная (4.2a), есть

<sup>1</sup>Условие калибровки  $(\mathbf{k}\mathbf{A}(\mathbf{k}, \lambda, t)) = 0$  даёт  $[\mathbf{k} \times \mathbf{A}(\mathbf{k}, \lambda, t)]^2 = \mathbf{k}^2 A^2(\mathbf{k}, \lambda, t)$ .

$x_0 = \sqrt{\hbar \cdot 4\pi c^2 / (\omega L^3)}$ ). Эти операторы описывают рождение и уничтожение квантов электромагнитного поля — **фотонов** с заданными волновым числом и поляризацией, они не действуют на состояния фотонов с другими квантовыми числами  $\mathbf{k}'$ ,  $\lambda'$ .

Выражая через эти операторы гармоники поля по образцу (4.3) и подставляя их в (14.14), получим полный вектор–потенциал в виде суммы вкладов всех гармоник — оператор поля<sup>1</sup>

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}} \left( \hat{a}(\mathbf{k}, \lambda) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}, \lambda) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} + \hat{a}^+(\mathbf{k}, \lambda) \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, \lambda) e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} \right). \quad (14.16)$$

Электрическое и магнитное поля при  $t = 0$  определяются с помощью (14.12):

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{E}}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{i\omega_k}{c} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}} \left[ \mathbf{k} (\hat{a}(\mathbf{k}, \lambda) \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, \lambda) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}^+(\mathbf{k}, \lambda) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}, \lambda) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}) \right], \\ \hat{\mathbf{B}}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k L^3}} \left[ i\mathbf{k} \times (\hat{a}(\mathbf{k}, \lambda) \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, \lambda) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}^+(\mathbf{k}, \lambda) \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}, \lambda) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}) \right]. \end{aligned} \quad (14.17)$$

Теперь выражения для операторов энергии и импульса поля принимают вид, совпадающий с известными выражениями для гармонического осциллятора. В частности, гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = \sum \hat{H}_{\mathbf{k}\lambda}, \quad \hat{H}_{\mathbf{k}\lambda} = \hbar\omega_k \left( \hat{n}_{\mathbf{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) \equiv \hbar\omega_k \left( \hat{a}^+(\mathbf{k}, \lambda) \hat{a}(\mathbf{k}, \lambda) + \frac{3}{2} \right). \quad (14.18)$$

Условие кулоновской калибровки для векторного потенциал (14.16) выглядит как равенство нулю коммутатора

$$\left[ \hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}) \right] = 0. \quad (14.19)$$

<sup>1</sup>Операторы электромагнитного поля, определённые в разных точках пространства–времени не коммутируют друг с другом. Явный вид и смысл соответствующих коммутаторов обсуждается в курсах КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ.

Чтобы убедиться в справедливости этого соотношения, достаточно вспомнить, что  $[\hat{p}, e^{i\mathbf{k}r}] = -i\hbar\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}r}$ . С учётом этого коммутатор (14.19) выглядит в точности как (14.16) с заменой  $\varepsilon(\mathbf{k}, \lambda)$  на скалярное произведение  $i\hbar\mathbf{k}\varepsilon(\mathbf{k}, \lambda)$ , равное 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  $\lambda_{\mathbf{k}, i}$ . Энергия и полный импульс этого состояния равны

$$E = \sum_{\mathbf{k}\lambda} n(\mathbf{k}, \lambda)\hbar\omega_{\mathbf{k}\lambda} + E_0, \quad E_0 = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hbar\omega_{\mathbf{k}\lambda}/2, \quad P = \sum_{\mathbf{k}\lambda} n(\mathbf{k}\lambda)\hbar\mathbf{k}. \quad (14.20)$$

Здесь  $E_0$  — энергия «нулевых колебаний вакуума». Её обычно отбрасывают, переходя к другому началу отсчёта энергии (см., впрочем, § 4.4).

В точности так же, как для обычного гармонического осциллятора в § 4.1, имеют место соотношения

$$\begin{aligned} \hat{a}^+(\mathbf{k}, \lambda_1)|n_1(\mathbf{k}, \lambda_1), n_2(\mathbf{k}, \lambda_2), n_3(\mathbf{k}', \lambda), \dots\rangle &= \\ = \sqrt{n_1(\mathbf{k}, \lambda_1) + 1}|n_1(\mathbf{k}, \lambda_1) + 1, n_2(\mathbf{k}, \lambda_2), n_3(\mathbf{k}', \lambda), \dots\rangle, \\ \hat{a}(\mathbf{k}, \lambda_2)|n_1(\mathbf{k}, \lambda_1), n_2(\mathbf{k}, \lambda_2), n_3(\mathbf{k}', \lambda), \dots\rangle &= \\ = \sqrt{n_2(\mathbf{k}, \lambda_2)}|n_1(\mathbf{k}, \lambda_1), n_2(\mathbf{k}, \lambda_2) - 1, n_3(\mathbf{k}', \lambda), \dots\rangle. \end{aligned}$$

В соответствии с (14.16) 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

$$\begin{aligned} \langle n(\mathbf{k}, \lambda) + 1, t|\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})|n(\mathbf{k}, \lambda), t\rangle &= \\ = \sqrt{n(\mathbf{k}, \lambda) + 1} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}}L^3}} \boldsymbol{\varepsilon}^*(\mathbf{k}, \lambda) e^{i(\omega_{\mathbf{k}}t - (\mathbf{k}\mathbf{r}))}, \\ \langle n(\mathbf{k}, \lambda) - 1, t|\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})|n(\mathbf{k}, \lambda), t\rangle &= \\ = \sqrt{n(\mathbf{k}, \lambda)} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}}L^3}} \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{k}, \lambda) e^{-i(\omega_{\mathbf{k}}t - (\mathbf{k}\mathbf{r}))}. \end{aligned} \quad (14.21)$$

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. 17).

*Пример.* Обсудим, какая минимальная энергия сигнала  $W = \hbar\omega N$  нужна, чтобы **наблюдать** вращение его плоскости поляризации на малый угол  $\phi$  в оптически активной среде [16] ( $N$  — число фотонов в сигнале).

Пусть волна распространяется в направлении оси  $z$ , а вектор её поляризации первоначально направлен вдоль оси  $x$ . При этом амплитуда электрического поля есть  $\mathbf{E}_{x0} \approx \sqrt{2\pi\hbar\omega N}$ . При повороте плоскости поляризации на малый угол  $\phi$  появляется небольшая составляющая поля, направленная вдоль оси  $y$ ,  $\mathbf{E}_{y0} = \mathbf{E}_{x0}\phi$ . Минимальное значение этой амплитуды, отвечающее регистрации одного фотона есть  $\mathbf{E}_{y0} \approx \sqrt{2\pi\hbar\omega}$ , 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 (11.11) не ковариантно. В частности, переход в движущуюся систему отсчёта 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 приведённое выше.

• Фотоны описывают векторное поле, т. е. реализуют векторное представление группы вращений, отвечающее моменту 1. Этот факт записывают, говоря, что спин фотона равен 1. Как и всякая частица, фотон может иметь ещё орбитальный момент (целочисленный)  $\ell$  и соответственно полный момент  $\mathbf{j} = \ell + \mathbf{s}$ . Оказывается, что для частицы, движущейся со скоростью  $c$ , разделение на спин и орбитальный момент смысла не имеет. Утверждение, что спин фотона равен 1, означает, что наименьшее значение  $j$  равно 1 и что чётность волновой функции фотона отрицательна.

В классической электродинамике для бесконечной плоской волны понятие момента импульса разумным образом не вводится. Если волна распространяется в направлении оси  $z$ , то компоненте момента импульса поля, направленной вдоль поля, появиться неоткуда. На самом деле мы всегда имеем дело с волновым пакетом, сосредоточенном в некотором объёме, и мы говорим о плоской волне, если, например, наш пакет имеет форму цилиндра, направленного вдоль  $z$ , размер «дна» которого намного больше длины волны. На краях цилиндра (в силу уравнений  $\operatorname{div} \mathbf{B} = 0$ ,  $\operatorname{div} \mathbf{E} = 0$ ) волна искривляется, появляются компоненты поля, направленные вдоль  $z$ , они приводят к появлению поперечных

компонент импульса поля и, соответственно, продольной компоненты момента. Простое вычисление (см. приложение Е) показывает, что для циркулярно поляризованной волны получающийся момент импульса в объёме поля (для всего набора фотонов в этом объёме) не зависит от положения оси в плоскости  $(x, y)$  и относится к энергии поля в этом объёме как  $1/\omega$  — так же, как для одного фотона со спином  $S = \hbar \cdot 1$  и энергией  $\hbar\omega$ .

**Газ излучения.** Рассмотрим 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 усреднённый по направлениям квадрат амплитуды поля в волне. С другой стороны, в рассматриваемом газе заселённость  $n_{\mathbf{k}\lambda}$  не зависит от направления векторов  $\mathbf{k}$  и  $\boldsymbol{\varepsilon}$ . Поэтому та же плотность энергии выражается через энергию одного фотона и плотность числа состояний на единицу объёма в этом интервале  $\rho(\omega) = \omega^2/(\pi^2 c^3)$  (16.27b):

$$\begin{aligned} U(\omega)d\omega &= \frac{\langle \mathbf{E}^2(\omega) + \mathbf{B}^2(\omega) \rangle}{2 \cdot 8\pi} V \rho(\omega) d\omega = \\ &= \frac{\langle \mathbf{E}^2(\omega) \rangle}{8\pi} V \rho(\omega) d\omega = n(\mathbf{k}\lambda) \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} d\omega. \end{aligned} \quad (14.22)$$

(Множитель  $1/2$  возник при усреднении  $\cos^2(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r})$  по времени.)

### § 14.3. Системы с взаимодействием

Представим гамильтониан системы в виде суммы одночастичных гамильтонианов  $\hat{H}_a^1$ , каждый из которых описывает состояния отдельной частицы  $a$ , и добавки  $\hat{V}$ , описывающей взаимодействие  $\hat{H} = \sum_a \hat{H}_a^1 + \hat{V}$ .

Пусть теперь добавка  $\hat{V}$  складывается из энергий взаимодействия пар частиц  $\hat{V} = \sum_{a,b} \hat{H}^{(2)}(ab)$ . Здесь  $a$  и  $b$  обозначают координаты частиц  $a$  и  $b$ . (Если необходимо учесть трёхчастичные взаимодействия, это делается сходным образом.)

Обозначим через  $|i\rangle$  собственные векторы одночастичного гамиль-

тониана  $\hat{H}^{(1)}$  и через  $E_i$  соответствующие значения энергии так, что

$$\hat{H}^{(1)} = \sum E_i |i\rangle\langle i|. \quad (14.23a)$$

В этом базисе оператор  $\hat{H}^{(2)}$ , действующий в пространстве, которое является прямым произведением пространств одночастичных состояний  $|k\rangle$ , записывается в виде матрицы

$$H_{ii'kk'}^{(2)} = \langle i|\langle i'|\hat{H}_{ab}^{(2)}|k\rangle|k'\rangle.$$

В представлении чисел заполнения нетрудно получить (подобно тому как это делалось при описании разных операторов в энергетическом представлении для осциллятора)

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_i E_i^{(1)} b_i^+ b_i + \hat{V} \equiv \sum E_i N_i + \hat{V}, \\ \hat{V} &= \sum_{i,i',k,k'} H_{ii'kk'}^{(2)} b_i^+ b_{i'}^+ b_k b_{k'}. \end{aligned} \quad (14.23b)$$

Подобные представления можно построить и для других операторов. В силу тождественности частиц операторы физических величин исчерпываются такими наборами.

Используя соотношения (14.5), взамен (14.23b) можно записать

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \int \hat{\psi}^+(q) \hat{H}^{(1)} \hat{\psi}(q) dq; \\ \hat{H}_2 &= \int \hat{\psi}^+(q) \hat{\psi}^+(q') \hat{H}^{(2)} \hat{\psi}(q') \hat{\psi}(q) dq dq'. \end{aligned} \quad (14.24)$$

### О взаимодействии электронов с решёткой

В кристаллах за счёт 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), эти отклонения можно описать как возмущения. Соответствующее изменение потенциала поля, создаваемого ионами есть  $e\delta(U(x))$ . Изменение энергии электрона, обусловленное смещением иона от равновесного положения, выражается через это изменение потенциала и через плотность числа электронов

$\rho(x) = \psi^*(x)\psi(x)$  соотношением  $V_1 = -e\rho(x)(dU/dx)\Delta x \equiv F\rho(x)\Delta x$ , где сила  $F = -edU/dx$ . 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 даётся соотношениями (7.43), а для электронов — соотношениями (7.8). В методе вторичного квантования коэффициенты последнего разложения приобретают смысл операторов рождения и уничтожения электронов. С учётом ортонормированности собственных функций оператора сдвига из выписанного выражения получается *гамильтониан электрон-фононного взаимодействия* (Фрёлиха), где сумма берётся по всем значениям квазиимпульсов  $p$  и  $k$ , а  $u_p(x)$  — блоховская амплитуда (7.6):

$$\hat{V} = \sum_{p,k} \frac{g_{pk}}{N\sqrt{M\omega_k}} \hat{a}_p^+ \hat{a}_{p-k} (\hat{a}_k + \hat{a}_{-k}^+), \quad (14.25)$$

$$g_{pk} = F \int_{\text{cell}} u_p(x) u_{p-k}(x) dx.$$

(Последний интеграл берётся по элементарной ячейке.)

Такой гамильтониан используется для описания процессов в кристаллах. В частности, в начале 1950-х г. при экспериментальном исследовании сверхпроводимости было обнаружено, что температура сверхпроводящего перехода зависит от массы изотопа. Подобная зависимость отсутствует в гамильтониане электрон-электронного взаимодействия, но присутствует в гамильтониане взаимодействия электрона с решёткой (14.25). 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.

## Глава 15

# Атомы, молекулы, ядра

В этой главе рассматриваются только *начальные элементы* физики атомов, молекул и ядер.

Как известно, атомы состоят из электронов и положительно заряженных ядер, размеры которых значительно меньше атомных размеров. Атом содержит  $Z$  электронов, он электрически нейтрален, заряд ядра равен (с точностью до знака) сумме зарядов входящих в атом электронов  $Ze$ . Устойчивость атома обеспечивается притяжением электронов к ядру, имеющему массу  $M_A \approx Am_p$  ( $A$  — атомный вес в единицах массы протона). При описании молекулы массы входящих в неё атомов обозначаются через  $M_i$ . В обоих этих случаях рассматривается только движение относительно центра масс, в атоме он практически совпадает с ядром.

### Порядки величин

◇ Энергии связи электронов в атоме определяются решением задачи об атоме водорода. Для внешних электронов это величины порядка  $(0,1 \div 1) Ry \sim 1 \div 10$  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  $Z^2 Ry$ , 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. Поскольку скорости движения молекул невелики по сравнению со скоростью

света, 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):

$$\left\langle \frac{\Delta\omega}{\omega} \right\rangle = \left\langle \frac{v}{c} \right\rangle \sim \left\langle \frac{\sqrt{kT/M}}{c} \right\rangle = \sqrt{\frac{kT}{Mc^2}}. \quad (15.1)$$

Для атома водорода ( $Mc^2 \approx 10^9$  эВ) при комнатной температуре ( $kT \approx 0,025$  эВ) это относительное уширение составляет  $5 \cdot 10^{-6}$ .

## § 15.1. АТОМЫ

В атоме каждый из электронов движется в поле, создаваемом ядром и всеми другими электронами. Полный гамильтониан атома можно записать в виде ( $i$  — номер электрона)

$$\hat{H} = \sum_i \frac{\hat{p}_i^2}{2m} - \sum_i \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \hat{H}_f + \hat{H}_{hf} + \hat{H}_L. \quad (15.2)$$

Здесь слагаемое  $\hat{H}_f$  описывает тонкое (спин-орбитальное) взаимодействие, слагаемое  $\hat{H}_{hf}$  описывает сверхтонкое взаимодействие, а  $\hat{H}_L$  — Лэмбовский сдвиг (см. ниже). Точное решение такой задачи связано с большими вычислительными трудностями даже для сравнительно простых систем типа атома гелия.

### 15.1.1. Самосогласованное поле. Электронные конфигурации

При изучении строения атомов обычно начинают с *приближения самосогласованного поля*, в котором считают, что каждый электрон в отдельности движется в 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 самосогласованном поле невелико, и это обуславливает эффективность рассматриваемой ниже картины. Это приближение учитывает первые два слагаемых и — усреднённо — третье слагаемое гамильтониана (15.2).

Вблизи ядра наружные электроны не создают поля, и  $Z^*(r) \approx Z$  (внутренний электрон «видит» только ядро). 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).

При таком подходе отличие поля от кулоновского на расстояниях, сравнимых с размером ядра, учитывается просто как изменение эффективного заряда  $Z^*(r)$  на малых расстояниях. В тяжёлых атомах для ближайших к ядру электронов следует учитывать ещё модификацию потенциала, эффективно описывающую релятивистские поправки.

Состояния электрона в этом самосогласованном поле характеризуются определённым значением орбитального момента  $\ell$ . Разные состояния с данным  $\ell$  нумеруются главным квантовым числом  $n \equiv n_r + \ell + 1$  — по образцу атома водорода, а полный набор составляют:  $n$ ,  $\ell$ , проекции момента и спина на избранную ось,  $m$  и  $s_z$ . Поскольку эффективное поле отличается от кулоновского, энергии состояний с данным  $n$  и разными  $\ell$  различаются. При заданных  $n$  и  $\ell$  состояния остаются вырожденными по значениям  $m$  и  $s_z$ .

Состояния отдельного электрона обозначают символом  $n\ell$ , где для  $\ell$  используют буквы  $s$ ,  $p$ ,  $d$ ,  $f$  (ср. обозначения на стр. 492) и т.д., а для  $n$  — его численное значение. Например, состояние  $4f$  обозначает состояние электрона с  $n = 4$ ,  $\ell = 3$ . Чтобы описать состояние атома, указывают состояния каждого из электронов, причём все состояния с одинаковыми  $n$  и  $\ell$  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  $\ell$  (их  $2n^2$ ) образуют *электронную оболочку*.

Как и для атома водорода, с ростом  $n$  растёт средний радиус электронных орбит, так что оболочки с  $n = 1, 2$  — внутренние, а с большими  $n$  — внешние.

Эта простая картина модифицируется поправками.

- (Кулоновское) взаимодействие электронов друг с другом, зависящее от расстояния между ними (*корреляционные силы*). Эти силы отвечают отклонению третьего слагаемого гамильтониана (15.2) от его усреднённого значения. Соответствующие разности энергий возникающих состояний — порядка кулоновской энергии атома водорода  $1 \text{ Ry}$ , с численным коэффициентом, который может оказаться небольшим, это — электронвольты.
- *Спин-орбитальное взаимодействие* спинового магнитного момента с орбитальным. Обычно это взаимодействие слабее корреляционного. Оно определяет *тонкую структуру (fine structure)* атомных спектров. Соответствующие поправки к энергии термов обычно составляют  $E_{fs} \sim (Zv/c)^2 \text{ Ry} \sim Z^2 \alpha^2 \text{ Ry}$ , т.е. доли электронвольт ( $0,001 \div 1 \text{ эВ}$ ).
- *Сверхтонкая структура (hyperfine structure)* атомных спектров обусловлена взаимодействием магнитного момента электрона (орбитального и спинового) с магнитным моментом ядра. Эти поправки к энергии ещё в  $M/m_e \sim 10^3 \div 10^4$  раз меньше энергий тонкой структуры.
- *Лэмбовский сдвиг* обусловлен различием во взаимодействии электрона с нулевыми колебаниями электромагнитного поля вакуума в тех состояниях, которые должны быть вырожденными при учёте остальных взаимодействий. Этот сдвиг  $E_L \sim \alpha^3 \ln \alpha \text{ Ry}$ , он примерно в 100 раз меньше энергии тонкой структуры.

При указанной иерархии поправок орбитальные моменты и спины электронов складываются в полный орбитальный  $L$  и спиновый  $S$  моменты атома ( $\mathbf{L} = \sum \boldsymbol{\ell}_i$ ,  $\mathbf{S} = \sum \mathbf{s}_i$ ), а те в свою очередь — в полный момент атома  $J$  ( $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ). Стандартное обозначение состояния атома как целого имеет вид  $^{2S+1}L_J$ . При этом значение  $L$  записывается прописной буквой  $S, P, D, \dots$  в соответствии с обозначениями на стр. 492, 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,  $1s^2 2s^2 2p, {}^2P_{3/2}$ .

Следует заметить, что первые два слагаемых гамильтониана (15.2) коммутируют с моментами импульса отдельных электронов  $\hat{\ell}_i$ , третье

(корреляционное) слагаемое не коммутирует с моментами импульса отдельных электронов  $\hat{\ell}_i$ , но суммарно коммутирует с полным орбитальным моментом импульса  $\hat{\mathbf{L}}$  и с суммарным спином электронов  $\hat{\mathbf{S}}$ . Слагаемое  $\hat{H}_f$  уже не коммутирует с операторами  $\hat{\mathbf{L}}$  и  $\hat{\mathbf{S}}$  по отдельности, но только с суммарным моментом  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ . Наконец, оператор сверхтонкого взаимодействия не коммутирует уже и с  $\hat{\mathbf{J}}$ .

### 15.1.2. Корреляционные силы. Правила Хунда

В рассматриваемом приближении с учётом тождественности электронов для каждой возможной конфигурации электронов коллективную волновую функцию записывают в виде детерминанта из функций, соответствующих одноэлектронным состояниям (13.5b). Возможные спиновые состояния определяются с учётом принципа Паули, каждому набору этих спиновых состояний отвечает своя симметрия пространственных функций (для пары электронов такой пример даёт (13.6)). Угловые зависимости даются сферическими гармониками (8.29), а для вычисления радиальных функций находят сначала зависимость эффективного заряда от радиуса  $Z(r)$ . При этом для  $Z(r)$  получается интегро-дифференциальное уравнение, форма и решение которого различны для разных электронных конфигураций. Это уравнение часто решают вариационным методом, подбирая подходящие пробные функции (см. пример в [1] § 6.9) — *метод Хартри-Фока* (В. А. Фок, 1930).

◇ Состоянием с наименьшей энергией является то, в котором спины электронов с данными  $n\ell$  в максимальной степени, допустимой принципом Паули, параллельны (симметричны). При этом достигается максимальная симметрия спиновой волновой функции и, соответственно, максимальная антисимметрия 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. Итак, наиболее энергетически выгодным оказывается состояние с наибольшим возможным значением  $S$ . Это — эффект обменного взаимодействия, разд. 13.2.

Корреляционные силы нарушают сферическую симметрию для отдельного электрона, но сохраняют её для атома в целом, под их воздействием моменты отдельных электронов складываются в суммарный орбитальный момент атома  $\mathbf{L} = \sum \ell_i$ . Качественно ясно, что с ростом  $\ell_z$  волновые функции отдельных электронов «размазываются» по всё

большей области пространства. При этом величина энергии кулоновского отталкивания уменьшается, более энергетически выгодным оказывается состояние с наибольшим возможным значением  $L$ .

Ситуацию обобщает *полуэмпирическое* правило Хунда:

наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным при данной электронной конфигурации значением  $S$  и наибольшим (возможным при этом  $S$ ) значением  $L$ .

 (15.3)

### 15.1.3. Атом гелия

Удобно начать с обсуждения задачи об атоме с зарядом ядра  $Ze$  и двумя электронами (в конце мы вспомним, что  $Z = 2$ )<sup>1</sup>. В пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием гамильтониан нашего атома имеет вид

$$\hat{H}(Z) = \hat{H}_0 + V_{12} : \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2}, \quad V_{12} = \frac{e^2}{r_{12}}. \quad (15.4)$$

Слагаемое  $\hat{H}_0$  описывает водородоподобные уровни электронов в поле ядра с зарядом  $Ze$ , а слагаемое  $V_{12}$  — их взаимодействие. Мы ведём вычисления в атомных единицах (9.14) и используем результаты § 9.3.

◇ **Основное состояние.** В соответствии с правилом Хунда, в основном состоянии пространственная волновая функция симметрична, т. е. спиновая антисимметрична. В этом состоянии полный спин атома равен нулю.

*Теория возмущений.* Мы выбираем  $\hat{H}_0$  за невозмущённый гамильтониан. Энергия основного состояния пары электронов для этого гамильтониана есть  $-2Z^2$ , а волновая функция есть произведение водородоподобных волновых функций  $\psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{01}(\mathbf{r}_1, Z)\psi_{02}(\mathbf{r}_2, Z)$ , где  $\psi_{0i}(\mathbf{r}_i, Z) = \sqrt{Z^3/\pi}e^{-Zr_i}$ . Обозначая  $dV_i \equiv d^3r_i \equiv r_i^2 dr_i d\Omega_i$ , запишем поправку к энергии в виде

$$\Delta E_1 = \int \psi_{01}^* \psi_{02}^* V_{12} \psi_{01} \psi_{02} dV_1 dV_2.$$

Разобьём область интегрирования на две подобласти (I)  $r_2 > r_1$  и (II)  $r_2 < r_1$ . Обозначая  $\rho_i(r) = |\psi_{0i}(r_i, Z)|^2 = (Z^3/\pi)e^{-2Zr_i}$ , запишем

<sup>1</sup>Метод работает и для описания ионов с большим  $Z$  и двумя электронами. Для случая  $Z = 1$  (ион  $H^-$ ) наше рассмотрение оказывается слишком грубым.

вклад первой подобласти в виде

$$\Delta E_1(I) = e \int_0^\infty \rho_1(r_1) 4r_1^2 dr_1 d\Omega_1 \left[ \int_0^{r_1} \rho_2(r_2) (e/r_{12}) r_2^2 dr_2 d\Omega_2 \right].$$

Интеграл в квадратных скобках представляет собой потенциал электрического поля, создаваемого вне сферы радиуса  $r_1$  сферически симметричным распределением зарядов внутри этой сферы — это  $q(r_1)/r_1$ , где  $q(r_1) = e \int_0^{r_1} \rho_2(r_2) r_2^2 dr_2 d\Omega_2$  — суммарный заряд внутри этой сферы<sup>1</sup>.

Обозначим  $x = 2Zr_1$ . Тогда прямое вычисление даёт для этого заряда  $q(r_1) = e [1 - e^{-x}(1 + x + x^2/2)]$ . Подставляя этот ответ в выражение для  $\Delta E_1$  и учитывая, что вторая подобласть даёт такой же вклад, найдём  $\Delta E_1 \equiv 2\Delta E_1(I) = 5Z/4$ . В итоге полная энергия основного состояния есть  $E_B^{pt} = -2Z^2 + 5Z/4$ .

*Вариационный метод.* Выберем в качестве пробной волновую функцию водородоподобного типа с зарядом  $Z^*$ , который и будет варьируемым параметром,  $\psi_0^{pp} = \psi_{01}(\mathbf{r}_1, Z^*)\psi_{02}(\mathbf{r}_2, Z^*)$ . Для вычисления варьируемой энергии атома  $\int \psi_0^{pp*} \hat{H}(Z) \psi_0^{pp} dV_1 dV_2$  запишем гамильтониан в виде суммы  $\hat{H}(Z) = \hat{H}(Z^*) + V_1$ , где  $\hat{H}(Z^*)$  есть гамильтониан «атома гелия» с зарядом ядра  $Z^*e$ , а  $V_1 = (Z^* - Z)e^2 [1/r_1 + 1/r_2]$ .

Энергия, отвечающая  $\hat{H}(Z^*)$  вычислена выше для  $Z^* = Z$ , это  $-2Z^{*2} + 5Z^*/4$ . Заметим далее, что

$$\int \psi_0^{pp*} (e^2/r_1) \psi_0^{pp} dV_1 dV_2 \equiv \int \psi_{01}^*(r_1, Z^*) (e^2/r_1) \psi_{01}(r_1, Z^*) dV_1.$$

Как и для любого водородоподобного атома, последний интеграл составляет  $2Z^*$ . Поэтому вклад двух слагаемых  $V_1$  в полную энергию составляет  $4(Z^* - Z)Z^*$ .

Собирая эти результаты, найдём  $E(Z^*) = 2Z^{*2} - 4ZZ^* + 5Z^*/4$ . Минимум этой энергии достигается при  $Z^* = Z - 5/16$ , что даёт энергию основного состояния  $E_B^{var} = -2(Z - 5/16)^2$ .

Подставляя  $Z = 2$  (атом гелия), мы получим  $E_B^{var} = -5,69Ry$  (в то время как выписанное ранее пертурбативное значение составляет  $E_B^{pt} = -5,5Ry$ ). Точное значение составляет  $E_B = -5,78Ry$  (78,6 эВ).

<sup>1</sup>Соотношение (B.20) даёт этот результат без обращения к электростатической аналогии.

Итак, оба вычисления дают неплохое согласие с опытом, и качество вариационного ответа несколько лучше.

◇ **Первое возбуждённое состояние** строится из состояний отдельных электронов  $1s$  и  $2s$  с тем же гамильтонианом, что и выше. При этом пространственная волновая функция имеет вид

$$\psi_{He\pm} = (\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) \pm \psi_1(r_2)\psi_2(r_1)) / \sqrt{2}.$$

Знак  $+$  отвечает антисимметричной спиновой функции (полный спин  $S = 0$  — *синглетное состояние — парагелий*), знак  $-$  отвечает симметричной спиновой функции (полный спин  $S = 1$  — *триплетное состояние — ортогелий*). Вычисление энергии этих состояний выполняется в полном подобии с вычислениями для основного состояния.

Естественным образом, при той же электронной конфигурации энергия ортогелия ( $S = 1$ ) меньше энергии парагелия ( $S = 0$ ) — (обменное взаимодействие — ср. разд. 13.2). Приведём экспериментальные значения энергии нижних уровней гелия

конфигурация	состояние	S	E (эВ)
$1s^2$	$^1S_0$	0 (парагелий)	-78,6
$1s,2s$	$^3S_1$	1(ортогелий)	-59,2
$1s,2s$	$^1S_0$	1(парагелий)	-58,4
$1s,2p$	$^3P_{0,1,2}$	1(ортогелий)	-58,0

Переходы между состояниями ортогелия и парагелия требуют значительной перестройки электронной оболочки, т. е. преодоления высокого потенциального барьера.

#### 15.1.4. Спин–орбитальное взаимодействие. Тонкая структура

Движение спинового магнитного момента электрона в электрическом поле, действующем на этот электрон, приводит к сдвигу энергии уровней, пропорциональному произведению этого магнитного момента на магнитный момент электрона, связанный с этим «орбитальным» движением (*спин–орбитальное взаимодействие*). Результативно оно сводится к взаимодействию двух магнитных диполей — орбитального и спинового  $\langle \hat{\mu}_\ell \hat{\mu}_s / r^3 \rangle$ . Такое понимание позволяет легко получить порядок величины соответствующей поправки к энергии. Действительно, каждый из магнитных моментов, по определению, включает дополнительный множитель  $v/c$  по сравнению с кулоновским взаимодей-

ствием зарядов, а в атоме  $v/c \sim Z_{eff}\alpha$ , где  $Z_{eff}$  — эффективный заряд ядра для электрона рассматриваемой оболочки. Поэтому энергия спин–орбитального взаимодействия по порядку величины составляет  $Z_{eff}^2\alpha^2 Ry$ . Разумеется, эта грубая оценка может модифицироваться достаточно большими численными множителями.

Перейдём к получению более аккуратной оценки. На электрон, движущийся со скоростью  $\mathbf{v}$  в электрическом поле  $\mathbf{E}$ , действует магнитное поле  $\mathbf{B} = -[\mathbf{v} \times \mathbf{E}]/c$ . Поскольку  $\mathbf{E} = -(\mathbf{r}/r)d\varphi/dr$ ,

$$\mathbf{B} = -[\mathbf{r} \times \mathbf{v}] \frac{(d\varphi/dr)}{erc} = -\frac{\hbar}{emcr} (d\varphi/dr) \boldsymbol{\ell}.$$

В итоге энергия взаимодействия спинового магнитного момента  $i$ -го электрона с этим полем (спин–орбитальное взаимодействие) свелась к взаимодействию двух магнитных диполей, орбитального и спинового:

$$V_{ls,i} = -\delta_i \boldsymbol{\mu}_s \mathbf{B} = A_i (\hat{\boldsymbol{\mu}}_{\ell,i} \hat{\boldsymbol{\mu}}_{i,s}) \equiv \beta_i (\hat{\boldsymbol{\ell}}_i \hat{\boldsymbol{s}}_i), \quad \delta_i \sim 1, \\ \beta_i \sim \frac{e\varphi'(r_i)}{r_i^2} \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 \sim \frac{e^2 Z^*(r_i)}{r_i^3} \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2 = Z^*(r) \left(\frac{a_B}{r}\right)^3 \alpha^2 Ry. \quad (15.5a)$$

Коэффициент  $\delta_i \sim 1$  введён, чтобы перенести вычисление, выполненное в неинерциальной системе отсчёта, где электрон покоится, в изучаемую инерциальную систему<sup>1</sup>, коэффициенты  $A_i$  и  $\beta_i$  — промежуточные обозначения, а  $Z^*(r)$  — «эффективный заряд» ядра и электронов, как он виден на расстоянии  $r$  от ядра.

Получившееся выражение следует просуммировать по всем электронам и усреднить по объёму,  $V_{LS} = \langle \sum V_{ls,i} \rangle$ . Усреднение по электронному состоянию атома с данными значениями суммарных момента импульса  $L$  и спина  $S$  даёт

$$V_{LS} = A \langle \hat{\mathbf{L}} \hat{\mathbf{S}} \rangle, \quad A \sim \left\langle \sum \beta_i \right\rangle. \quad (15.5b)$$

Из-за множителя  $1/r^3$  основной вклад при усреднении даёт область малых  $r$ , где волновая функция такова же, как и у водородоподобного атома с зарядом ядра  $Ze$  (см. стр. 223), при этом  $Z^* = Z$ . Вспомним

<sup>1</sup>Вычисление этого коэффициента в релятивистской теории даёт  $\delta_i = g_i - q_i/2$ , где  $g_i$  — гиромагнитное отношение для частицы  $i$  в единицах магнетона Бора (11.6), а  $q_i$  — её электрический заряд в единицах заряда электрона  $e$ . Для электрона, протона и нейтрона получается соответственно  $\delta_e \approx 0,5$ ,  $\delta_p \approx 2,29$ ,  $\delta_n \approx -1,91$ .

теперь, что для такого атома  $e^2 Z/r \sim Z^2 \cdot \text{Рy}$  и  $r \approx a_B/Z$  (9.14). Поэтому в основной области  $r \lesssim a_B/Z$  мы имеем  $\beta_i \sim Z^4 \alpha^2 \text{Рy}$ . Однако для внешнего электрона 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

$$A \sim (Z\alpha)^2 \text{Рy}. \quad (15.5c)$$

▽ Если электронная конфигурация такова, что имеется всего одна незаполненная оболочка, и эта оболочка заполнена менее чем наполовину, то  $A > 0$ , и для состояния с наименьшей энергией  $J = |L - S|$ ; в противоположном случае  $A < 0$ , и для состояния с наименьшей энергией  $J = L + S$  [1].

• Итак, спин-орбитальное взаимодействие приводит к зависимости энергии уровня атома от взаимной ориентации момента импульса и спина, т. е. от полного момента атома  $J$ . Эту зависимость называют *тонкой структурой*. Поскольку  $2\langle \hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{S}} \rangle \equiv \langle \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2 \rangle$ , спин-орбитальная поправка к энергии есть

$$\Delta E_J = \frac{A}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \quad (15.6)$$

с характерной энергией (15.5c), а расстояние между соседними уровнями  $\Delta E_{J, J-1} = AJ$  — *правило интервалов Ланде*. (Разумеется, у состояний с  $L = 0$  и (или)  $S = 0$  расщепления тонкой структуры нет.)

Тонкую структуру можно наблюдать, например, в спектре поглощения света. Обозначим через  $E_{nL}$  энергию основного состояния атома без учёта тонкой структуры и через  $E_{n'L'}$  определённую в том же приближении энергию атома, в котором электрон с «внутренней» орбиты переместился на внешнюю орбиту так, что главное квантовое число  $n$  заменилось на  $n'$  и момент импульса атома стал  $L'$ . Тогда в спектре поглощения будут наблюдаться полосы, отвечающие частотам

$$\omega = \frac{E_{n'L'} - E_{nL}}{\hbar} + \frac{A'[J'(J'+1) - L'(L'+1) - S'(S'+1)] - A[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]}{2\hbar}.$$

Здесь штрихованные величины отвечают состояниям возбуждённого атома, которые определяются по приведённой выше схеме.

▼ Для тяжёлого атома ( $Z \gg 1$ ) спин–орбитальное взаимодействие (15.5) может оказаться сильнее корреляционного. В таком случае главная поправка описывается приближением, в котором формируются полные моменты отдельных электронов  $\mathbf{j}_a \equiv \boldsymbol{\ell}_a + \mathbf{s}_a$ , а  $V_{corr}$  описывает следующее приближение, которое даёт полный момент  $\mathbf{J} = \sum \mathbf{j}_a$ . Этот случай называют *случаем  $jj$ -связи*. Случай чистой  $jj$ -связи для элементов таблицы Менделеева не реализуется, и для тяжёлых атомов приходится иметь дело с трудно вычислимым случаем смешанной  $jj$ - и  $LS$ -связи.

▽ Тонкая структура уровней атома водорода имеет свои особенности, обусловленные более высокой симметрией поля в этом атоме. Они обсуждаются в приложении § F.6.

### 15.1.5. Малые поправки

• **Сверхтонкая структура** термов возникает из-за взаимодействия магнитного момента электрона (орбитального и спинового)  $j$  с магнитным моментом ядра, имеющего спин  $I$ . По порядку величины для атома водорода энергия этого взаимодействия составляет

$$\begin{aligned} E_{hf} &\sim g_F \left\langle \frac{\mu_e \mu_A}{r^3} \right\rangle \sim g_F \frac{e\hbar}{2m_e c} \cdot \frac{e\hbar}{2M_p c} \cdot \frac{1}{a_B^3 n^3 (\ell + 1/2) j(j+1)} \sim \\ &\sim g_F \frac{m_e}{M_p} \cdot \frac{\alpha^2 \text{Ry}}{n^3 (\ell + 1/2) j(j+1)}. \end{aligned} \quad (15.7)$$

Здесь  $M_p$  — масса протона (магнитный момент ядра складывается, грубо говоря, из магнитных моментов составляющих его протонов и нейтронов), мы учли значение среднего  $\langle 1/r^3 \rangle$  (В.26), в котором с учётом спина электрона произведена замена  $\ell(\ell+1) \rightarrow j(j+1)$ . Наконец, фактор Ланде  $g_F$  отвечает сложению моментов электрона и ядра в полный момент атома  $\mathbf{F} = \mathbf{j} + \mathbf{I}$ .

В соответствии с оценкой (15.1), это расщепление при комнатной температуре «тонет» в тепловом уширении и наблюдаемо в спектрах лишь при достаточно низких температурах. В то же время можно наблюдать переходы между состояниями сверхтонкой структуры (в радиочастотном диапазоне). Поскольку эти состояния имеют одинаковую чётность, указанные переходы могут быть только магнитно–дипольными или квадрупольными (запрещёнными). Поэтому соответствующие времена жизни очень велики, зато хорошо наблюдается резо-

нанное рассеяние на частотах этих переходов (см. § 16.5). В частности, для основного состояния атома водорода ( $n = 1, \ell = 0, j = I = 1/2$ ) переход из состояния с  $F = 1$  в состояние с  $F = 0$  происходит на частоте  $\Delta E_{hf,H}/(2\pi\hbar) = 1420$  МГц, отвечающей длине волны 21 см. При температурах ниже  $(3/4)Ry \approx 10$  эВ  $\approx 100000^\circ$  К практически весь межзвёздный атомарный водород находится в основном состоянии, и заселённости обоих термов сверхтонкой структуры этого состояния одинаковы. Сигналы с длиной волны 21 см сильно рассеиваются на атомах водорода в атмосфере, делая невозможной радиолокацию в точности на этой длине волны (более 60 лет назад это послужило причиной прекращения выпуска серии локаторов, созданных в США для военно-морского флота и одновременно положило начало радиоастрономии с использованием этих локаторов).

Существующие облака межзвёздного атомарного водорода излучают на этой длине волны, давая значительный сигнал, который используется для локации этих облаков. При распространении сигнала на этой частоте резонансное перерассеяние на этих атомах выступает как усилитель — ретранслятор сигнала. Это представляется удобным способом передачи сигнала между далекими цивилизациями. Международный проект СЕТИ занимался «прослушиванием» и поиском регулярностей в таком сигнале с разных галактических направлений.

Высшие моменты ядра (квадрупольный, октупольный) также взаимодействуют с магнитным моментом электрона, но эти эффекты обычно исчезающе малы (подавление степенями  $m_e/M_N$ ).

• **Изотопический сдвиг.** *Изотопами* называются ядра с одинаковым зарядом ядра (номером в периодической системе), но с разными массами. У атомов, имеющих ядрами разные изотопы, уровни немного различаются по двум причинам.

1. В описание атома входит приведённая масса электрона, которую в задаче двух тел (атом водорода) можно записать с хорошей точностью как  $m_e M_A / (m_e + M_A) \approx m_e (1 - m_e / M_A)$  (9.1a), 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 понятия приведённой массы нет, но по порядку величины изменение энергий уровней определяется сходной величиной  $\delta_M \approx m_e \Delta M_A / M_A^2$ .

2. Ядра разных изотопов имеют разные размеры  $r_A$ . Простую грубую оценку можно получить, считая, что заряд внутри ядра распределён равномерно так, что при  $r < r_A$  энергия электрон-ядерного взаимодействия есть (вспомните электростатику)  $V_{eA-in} = -e^2 Z/r_A \cdot (r/r_A)^2$ . Поскольку возникающий эффект очевидно мал, здесь можно использовать теорию возмущений, считая за возмущение разность между истинным потенциалом  $V_{eA-in}$  и чисто кулоновским, т. е.

$$V_i = \begin{cases} Ze^2/r \cdot (1 - (r/r_A)^3) & \text{при } r \leq r_A \\ 0 & \text{при } r > r_A. \end{cases}$$

По обычным правилам теории возмущений поправка к энергии состояния с квантовыми числами  $n, \ell, m$  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 значения волновых функций  $\psi_{n\ell m}$  только при  $r = 0$ . В соответствии с (9.17), 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. (9.17b))  $Z^3/(n^3 a_B^3)$ . Однако с ростом расстояния от ядра эффективный заряд уменьшается, что даёт 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  $\delta E_A = (Ze^2/r_A)(Zr_A^3)/(a_B^3) \approx (Zr_A/a_B)^2 \text{Ry}$ . В итоге вклад в изотопический сдвиг, обусловленный различием размеров ядра для изотопов составляет ничтожную (но измеримую) величину

$$\Delta \delta E_A \sim \frac{Z^2 \delta(r_A^2)}{a_B^2} \text{Ry}.$$

### 15.1.6. Периодическая система элементов

Теперь мы готовы к тому, чтобы понять природу зависимости химических свойств элемента от его атомного номера — периодической таблицы Менделеева.

Начнём с описания основного состояния некоторого атома. Электроны заполняют состояния с наименьшими возможными энергиями, допускаемыми принципом Паули. При описании их конфигурации мы используем полученные в § 9.1 выводы, а именно: *при заданном  $n$  энергия состояния растёт с ростом  $\ell$ ; наоборот, при заданном значении  $\ell$  энергия состояния растёт 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 всё 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 всё 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 всё и кончается. 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. Поэтому энергия этих оболочек оказывается равной или меньшей, чем у оболочек с меньшими  $n$ , но большими  $\ell$ . В результате различные состояния распределяются на последовательно заполняющиеся состояния следующим образом:

Состояния	Число электронов
$1s$	2
$2s, 2p$	8
$3s, 3p$	8
$4s, 3d, 4p$	18
$5s, 4d, 5p$	18
$6s, 4f, 5d, 6p$	32
$7s, 6d, 6f,$	

Для инертных газов  $L = S = J = 0$ . Для незаполненных оболочек значения  $L$  и  $S$  определяются с помощью правил Хунда (15.3). Значение  $J$  определяется знаком константы  $A$  в  $LS$ -взаимодействии (см. обсуждение на стр. 313). Если оболочка с данным  $\ell$  заполнена менее чем наполовину, то  $A > 0$ , спин-орбитальная поправка к энергии (15.6) минимальна при наименьшем возможном  $J$ , *низшим является состояние с наименьшим возможным значением  $J = |L - S|$* . Точно так же если оболочка с данным  $\ell$  заполнена более чем наполовину, то  $A < 0$ , и *низшим является состояние с наибольшим возможным значением  $J = L + S$* .

*Пример* — оболочка  $3p^3$ . Следует рассмотреть 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 наиболее слабо 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. Они и 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 ещё точнее для  $f$ -оболочек, которые порождают семейства элементов близнецов — редкие земли (лантаноиды) и актиниды. В этих элементах знак константы спин-орбитального взаимодействия может быть другим, чем у элементов, где обсуждаемой инверсии нет.

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 них во внешней  $p$ -оболочке имеется по одному свободному состоянию, и они проявляют сильную химическую активность в стремлении заполнить его чужим электроном.

### 15.1.7. Атом в магнитном поле

- Начнём с напоминания.

Если энергия системы в магнитном поле уменьшается, вещество втягивается в область, занимаемую магнитным полем. Такое вещество называется *парамагнетиком*. В частности, если магнитный момент атома конечен при  $\mathcal{B} \rightarrow 0$  (собственный магнитный момент атома отличен от нуля), то в веществе, составленном из таких атомов, энергетически выгодной является ориентация момента, параллельная полю, — вещество парамагнитно.

Если же энергия системы в магнитном поле увеличивается, вещество выталкивается из области, занимаемой магнитным полем. Такое вещество называется *диамагнетиком*.

Подчеркнём, что мы рассматриваем ниже только свойства **атомов** — они реализуются в разреженных газах. Некоторые молекулы, составленные из парамагнитных атомов, проявляют диамагнитные свойства, примеры —  $\text{N}_2$ , кристаллы галогенидов, алмаз, кремний.

■ Изменение энергии основного состояния атома в магнитном поле различно для разных значений  $J$ ,  $L$  и  $S$ .

• Простейшую ситуацию доставляет нам случай  $J = L = S = 0$  (*благородные газы* He, Ar, ... и *элементы второго столбца периодической системы с внешней электронной конфигурацией  $ns^2$  с заполненной внутренней оболочкой* — Be, Mg, Zn и др.). Для этих атомов линейное по полю слагаемое гамильтониана обращается в нуль, и поправка к энергии атома в магнитном описывается обычно отбрасываемым слагаемым  $\hat{H}_2$  в гамильтониане (11.12), просуммированном по всем электронам

$$\hat{H}_2 = e^2 \sum_a [\mathbf{r}_a \times \mathcal{B}]^2 / (8mc^2) \equiv e^2 \mathcal{B}^2 \sum_a (r_a \sin^2 \theta_a) / (8mc^2).$$

Усреднение по углам для сферически симметричного состояния даёт  $\langle \sin^2 \theta \rangle = 2/3$ , т. е.

$$\Delta E_{BB} = e^2 \mathcal{B}^2 \sum_a r_a^2 / (12mc^2). \quad (15.8a)$$

Эта поправка к энергии в магнитном поле положительна, т. е. такие вещества — диамагнетики.

Поучительно получить грубую оценку этой поправки. Входящие сюда размеры  $r_a$  не превышают боровского радиуса  $a_B$  (см. обсуждение в разд. 15.1.8). Поэтому мы примем  $\sum_a r_a^2 \approx Z a_B^2$ . Вспоминая, что  $e^2/a_B = 2Ry = mc^2\alpha^2$ , мы найдём

$$\Delta E_{BV} \sim \frac{Z\alpha^2}{2} \cdot \left[ \frac{\mathcal{B}^2}{8\pi} \cdot \frac{4\pi}{3} a_B^3 \right] \sim (\mathcal{B}/B_c)^2 Z^5 \alpha^4 Ry. \quad (15.8b)$$

Выражение в квадратных скобках равно энергии внешнего магнитного поля  $B$  в объёме атома. Мы сочли полезным добавить сюда и второе выражение — через вводимое ниже для случая ненулевых  $J, L, S$  критическое поле  $B_c$  (15.9).

• Простой для обсуждения случай доставляют атомы с электронной конфигурацией  $ns^1$  на внешней оболочке и заполненной внутренней оболочкой — водород и щелочные металлы Li, K, Na, Rb, Cs. Для этих атомов  $L = 0, S = 1/2$ , тонкой структуры нет, и магнитные свойства определяются простым взаимодействием со спином, магнитный момент равен  $2\mu_B \mathbf{S}$ . Эти вещества — парамагнетики.

• Наиболее распространённый случай не равных нулю  $J, L, S$  требует более детального исследования.

Уровни энергии уединённого атома вырождены по направлениям с кратностью вырождения  $2J + 1$ . В однородном магнитном поле  $\mathcal{B} = (0, 0, \mathcal{B})$  это вырождение снимается за счёт магнитного взаимодействия (11.3), (11.5) (*эффект Зеемана*). Пока поле невелико, взаимодействие с магнитным полем лишь немного расщепляет уровни тонкой структуры. Назовём критическим то значение поля  $B_c$ , при котором характерная энергия электрона в магнитном поле  $\mu_B B$  сравнивается с энергией тонкой структуры. Для грубой оценки можно использовать (15.5c), что даёт

$$B_c \sim Z^2 \alpha^2 (mc/e\hbar) Ry \equiv Z^2 \alpha^4 \cdot (m^2 c^3 / e\hbar). \quad (15.9)$$

В реальных атомах критическое поле  $B_c \sim 50 \div 100$  килоргаусс.

♦ В слабом магнитном поле  $\mathcal{B} \ll B_c$  магнитное взаимодействие можно рассматривать как малую поправку к описанию системы с  $LS$  взаимодействием, когда полный орбитальный момент  $L$  и пол-

ный спин  $S$  системы складываются в полный момент  $J$  — *аномальный эффект Зеемана*.

◇ Сдвиг энергии состояния, в котором проекция момента на направление поля, равна  $M$ , описывается соотношением

$$\Delta E = \mu_B \mathcal{B} \langle JM | \hat{V} | JM \rangle \quad (\hat{V} = \hat{L} + 2\hat{S}).$$

Входящее сюда среднее вычисляется с помощью (12.17):

$$\langle JM | V_z | JM \rangle = \frac{\langle JM | J_z | M, J \rangle \langle JM | (\mathbf{J}\mathbf{V}) | JM \rangle}{J(J+1)},$$

где  $(\mathbf{J}\mathbf{V}) = \mathbf{J}^2 + (\mathbf{J}\mathbf{S})$ . Запишем теперь:

$$L^2 \equiv (\mathbf{J} - \mathbf{S})^2 \equiv \mathbf{J}^2 + \mathbf{S}^2 - 2(\mathbf{J}\mathbf{S}) \Rightarrow (\mathbf{J}\mathbf{V}) = \mathbf{J}^2 + (\mathbf{J}^2 - L^2 + S^2)/2.$$

Вычисляя среднее от последней суммы операторов, найдем сдвиги уровней

$$\Delta E = g\mu_B M \mathcal{B}, \quad g = \frac{3J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (15.10)$$

Таким образом, магнитный момент атома пропорционален и сонаправлен его полному моменту  $\mathcal{M}_z = g\mu_B \mathbf{J}_z$ . При  $g > 0$  вещество, составленное из таких атомов, является парамагнетиком. Коэффициент пропорциональности  $g$  называют *множителем Ланде*.

◇ Результат (15.10) даёт  $\Delta E = 0$  для атомов с электронной конфигурацией  $np^2$  на внешней оболочке с заполненной внутренней оболочкой  $C, Si, Ge, Sn, Pb$ , для них  $L = S = 1$  и  $J = L - S = 0$ , (т.к. в (15.5)  $A > 0$ ) (элементов с  $L = S > 1$  и  $J = L - S = 0$  в периодической таблице нет)<sup>1</sup>. В этих случаях необходимо вычислять поправки, квадратичные по полю. Одна из этих поправок — из слагаемого  $\hat{H}_2$  гамильтониана (11.12) вычислена выше (15.8). Помимо этого, следует вычислить ещё поправки второго порядка теории возмущений, связанные с возбуждениями состояний тонкой структуры. Направив ось  $z$  вдоль магнитного поля и используя волновые функции (12.8), найдём, что для переходов из основного состояния под действием оператора взаимодействия

<sup>1</sup>Точно так же получается  $\Delta E = 0$  для возбуждённых состояний тонкой структуры с  $g = 0$  (например,  $4D_{1/2}$ ).

(11.12) отличен от нуля только матричный элемент между состояниями тонкой структуры с  $J = 0$  и  $J = 1$ ,  $V_{J=0, J=1} = \mu_B \mathcal{B} / \sqrt{2}$ . Поправка второго порядка теории возмущений есть  $\Delta E_2 = \frac{|V_{J=0, J=1}|^2}{E_{J=0} - E_{J=1}}$ . Используя теперь (15.5), найдём

$$\Delta E_2 = -(\mu_B \mathcal{B})^2 / 2A = -(1/2)\mu_B \mathcal{B} (\mathcal{B} / B_c) \quad (15.11)$$

(во втором выражении использовано выражение для критического поля (15.9)). В соответствии с общими правилами, поправка  $\Delta E_2$  к энергии основного состояния отрицательна (см. обсуждение на стр. 131). По модулю эта величина лишь немногим меньше типичной Зеемановской поправки (1-го порядка по  $\mathcal{B}$ ). Подставив в  $\Delta E_2$  выражение для  $B_c$ , мы получим ещё одну оценку  $|\Delta E_2| \sim Z^2 \alpha^2 (\mathcal{B} / B_c)^2 Ry$ . Эта величина очевидно больше поправки  $\Delta E_{BB}$  (15.8). Таким образом, в целом энергия в магнитном поле уменьшается, поэтому атомы рассматриваемых веществ парамагнитны. Однако, этот парамагнетизм — очень слабый, молекулы и кристаллы из таких атомов нередко диамагнитны.

♦ **В сильном магнитном поле  $\mathcal{B} \gg B_c$**  основным является взаимодействие с полем, а  $LS$  взаимодействие (расщепление тонкой структуры) следует рассматривать как возмущение. В этом случае в качестве невозмущённых 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 — эффект Пашена–Бака*)

$$\begin{aligned} \Delta E &= \mu_B \langle L, L_z; S, S_z | \hat{V} + A \hat{L} \hat{S} | L, L_z; S, S_z \rangle = \\ &= \mu_B (L_z + 2S_z) + AL_z S_z. \end{aligned} \quad (15.12)$$

В пренебрежении спин–орбитальным взаимодействием 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  $AL_z S_z$ , и величина этого расщепления — того же порядка, что и расстояние между уровнями тонкой структуры в отсутствие магнитного поля. Так обстоит дело для случая  $L = 1$ ,  $S = 1$ , когда двукратно вырождены в главном приближении термы, отвечающие  $[(L_z = 1, S_z = 0)$  и  $(L_z = -1, S_z = 1)]$  и  $[(L_z = -1, S_z = 0)$  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. 10. Обратите внимание, что масштаб расщепления на правом рисунке много больше, чем на левом. Кроме того, все термы

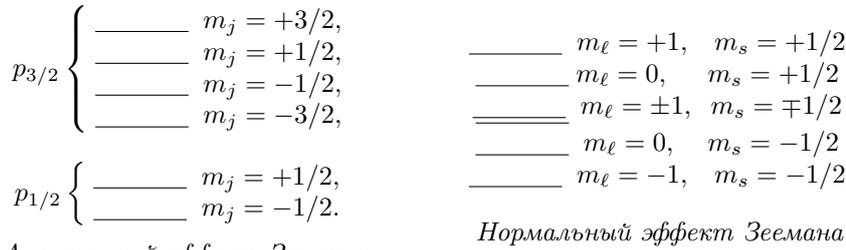


Рис. 10. Расщепление термов для одного  $p$ -электрона в магнитном поле

тонкой структуры и магнитные термы слева лежат выше невозмущённого терма (мы выбрали  $A > 0$ ). На правом рисунке магнитные термы расположены симметрично относительно невозмущённого 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 (11.6) это расщепление составляет примерно одну тысячную от расстояния до следующего магнитного уровня.

◆ При  $B \sim B_c$  структура уровней описывается не таким простым образом, поскольку необходимо учитывать одновременно оба взаимодействия, и спин-орбитальное и магнитное.

◆ В очень сильном поле или для высоко возбуждённых состояний атома ларморовский радиус  $\rho_B$  сближается с характерным масштабом движения в отсутствие поля  $\bar{a}$  (11.13), в этом случае необходимо учитывать оба слагаемых, содержащих магнитное поле в (11.12). При  $\bar{a}/\rho_B \gg 1$  мы имеем дело с уровнями Ландау, слегка модулированными кулоновским взаимодействием.

◆ Мы выяснили, что в умеренном по величине магнитном поле для многих веществ добавка к энергии пропорциональна первой степени поля  $B$ , т. е. и магнитная проницаемость  $\bar{\mu} \neq 1$ . Однако, для большинства парамагнетиков  $|\bar{\mu} - 1| \ll 1$ . Такое отличие от  $\bar{\epsilon}$  обусловлено тем, что магнитное взаимодействие содержит множитель  $v/c$ , который для атомной системы — малая величина порядка  $\alpha = 1/137$ .

### Применения — для случая слабого поля.

◇ Магнитное поле, действующее на электроны атомов и ионов, включённых в молекулы или кристаллы, отличается от измеряемого поля по двум причинам, во-первых, из-за частичного экранирования внешнего поля окружающими ионами и атомами (изучавшееся в курсе электродинамики отличие действующего на электрон поля от среднего поля в среде), 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*. Использование этих особенностей магнитного расщепления уровней является мощным методом изучения вещества.

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 свободен метод **электронного парамагнитного резонанса (ЭПР)**. Рассматриваемую систему помещают в магнитное поле. Через неё пропускают в направлении, перпендикулярном полю, электромагнитную волну с частотой  $\omega \approx g\mu_B B/\hbar$  и изучают зависимость коэффициента поглощения от  $\omega$  или зависимость намагниченности от времени при разных  $\omega$ . Поглощение максимально тогда, когда поле волны входит в резонанс с переходами между магнитными уровнями системы, т. е. частота  $\omega$  совпадает с энергией магнитных переходов (делённой на  $\hbar$ ), вне зависимости от скорости теплового движения молекулы. Положение резонанса даёт величину эффективного фактора Ланде (который независимо оценивается по мультиплетности магнитного расщепления). Важную информацию удаётся получить и по форме линии. (Эта форма обусловлена особенностями затухания, которое в свою очередь определяется свойствами взаимодействия изучаемого объекта с окружением.) Типичные измерения ЭПР требуют частот в десятки и сотни мегагерц.

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).

◇ 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. Как и в предыдущем случае, в такой системе под действием внешнего периодического поля подходящей частоты возникает ядерный магнитный резонанс (ЯМР).

В соответствующих экспериментах приходится использовать значительно более сильное магнитное поле, чем при изучении ЭПР. Полученные спектры ЯМР 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 определённого сорта, что является основой ЯМР-томографии.

### 15.1.8. Атомы с большим числом электронов. Модель Томаса–Ферми

Рассмотрим теперь атомы с большим числом электронов  $Z$ . Прежде всего заметим, что описание упрощается в двух предельных случаях. «Самый наружный» электрон находится в суммарном поле ядра  $Ze$  и  $Z - 1$  электрона, т. е. в кулоновском поле единичного заряда (как водород). Поэтому характерный внешний размер нашего атома — того же порядка, что и размер атома водорода  $a_B$ . «Самый внутренний» электрон «видит» только кулоновское поле ядра  $Ze$  на расстояниях  $\sim a_B/Z$ , наружные электроны почти не влияют на внутренний. Предметом обсуждения является большинство электронов, располагающиеся на таких расстояниях  $r$ , что  $a_B/Z \ll r \ll a_B$ . Вне этой области можно пользоваться результатами для водородоподобных атомов.

В модели Томаса–Ферми (1927 г.) совокупность электронов рассматривается как газ невзаимодействующих фермионов при нулевой температуре, помещённых во внешнее самосогласованное поле  $\varphi(r)$ , которое связано с плотностью заряда  $\rho(r) = -en(r)$  уравнением Пуассона

$$\Delta\varphi = -4\pi(-en(r) + Ze\delta(\mathbf{r})). \quad (15.13)$$

Второе слагаемое в правой части описывает вклад ядра с зарядом  $Ze$ . Отметим, что это слагаемое содержит трёхмерную  $\delta$ -функцию, которая не совпадает с  $\delta$ -функцией от радиуса (см. подробнее прил. В.1).

Чтобы получить ещё одно уравнение, связывающее  $\rho$  и  $\varphi$ , мы воспользуемся квазиклассическим приближением и идеями статистической физики. Прежде всего, напомним, что в соответствии с (6.11) и с принципом Паули на элемент фазового объёма  $d^3p d^3x$  приходится  $dn = 2d^3p d^3x / (2\pi\hbar)^3$  возможных состояний электронов (множитель 2 отвечает двум возможным направлениям спина). При нулевой температуре в каждом сферическом слое  $(r, r + dr)$  электроны занимают все возможные состояния с энергией, не превосходящей некоторую энергию  $\varepsilon_F(r)$ , которую называют энергией Ферми. Эта энергия во всех слоях должна быть одинаковой, в противном случае электроны переходили бы в область, где эта энергия меньше. Поэтому далее мы опускаем аргумент  $r$  в энергии Ферми  $\varepsilon_F$ . Если полная энергия какого-нибудь электрона положительна, он может «убежать» от атома, следовательно  $\varepsilon_F \leq 0$ . С другой стороны, для рассматриваемого нами нейтрального атома имеет место полное экранирование поля, стало быть «на границе атома» потенциал близок к нулю, и при нулевом значении импульса электрон имеет нулевую энергию, поэтому  $\varepsilon_F = 0$ . (Для иона поле экранируется не полностью, и  $\varepsilon_F < 0$ ).

«Атомный слой»  $(r, r + dr)$  занимают электроны с импульсами  $p$  и энергиями  $\varepsilon = p^2/2m - e\varphi(r)$ . Поскольку  $\varepsilon \leq \varepsilon_F = 0$ , максимальное значение импульса в слое — «импульс Ферми», отвечающий данному радиусу  $p_F(r)$ , составляет  $p_F = \sqrt{2me\varphi(r)}$ . Число состояний в этом слое составляет

$$n(r) 4\pi r^2 dr = 2 \cdot 4\pi r^2 dr \int_0^{p_F} 4\pi p^2 dp / (2\pi\hbar)^3 = 4r^2 dr p_F^3(r) / (3\pi\hbar^3).$$

Таким образом, входящая в (15.13) плотность заряда составляет

$$\rho(r) = -en(r) = -e(2me\varphi(r))^{3/2} / (3\pi^2\hbar^3). \quad (15.14)$$

Подставляя это соотношение в (15.13), мы получаем уравнение для определения потенциала. Далее (как в общей задаче о радиальном движении в центральном поле) удобно перейти к новой неизвестной функции  $\varphi(r) = Ze \frac{\chi(r)}{r}$ . В уравнении для этой функции слагаемое с  $\delta$ -функцией, дающее поле вблизи ядра, выпадает, и получается

$$r^{1/2} \frac{d^2\chi}{dr^2} = \frac{8\sqrt{2Z}(me^2)^{3/2}}{3\pi\hbar^3} \chi^{3/2}.$$

Далее удобно сделать замену переменных, поглощающую все размерные коэффициенты в этом уравнении,  $r = Ax$ :

$$\sqrt{x} d^2\chi/dx^2 = \chi^{3/2}, \quad (15.15)$$

$$A = \frac{\hbar^2}{me^2} \left( \frac{3\pi}{8\sqrt{2}} \right)^{2/3} \cdot Z^{-1/3} = 0,885 a_B Z^{-1/3}.$$

Таким образом, характерный масштаб зависимости потенциала от расстояния до ядра даётся Боровским радиусом, делённым на  $Z^{1/3}$  (электроны «ближе» к ядру, чем в атоме водорода, из-за более сильного притяжения ядра)<sup>1</sup>.

Полученное уравнение решается с двумя граничными условиями: при  $r \rightarrow 0$  поле определяется зарядом ядра,  $\chi(x \rightarrow 0) \rightarrow 1$ ; вдали от атома поле ядра полностью экранировано,  $\chi(x \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ . Полученная численно функция  $\chi(x)$  показана на рис. 11. Она быстро падает с ростом  $x$ , в частности,  $\chi(0) = 1$  (граничное условие),  $\chi(1) = 0,42$ ,  $\chi(10) = 0,024$ .

Используя (15.14), легко вычислить плотность числа электронов в зависимости от радиуса. Мы видим, что это распределение в разных атомах одинаково зависит от переменной  $rZ^{-1/3}$ . Прямое вычисление показывает, что половина полного электронного заряда находится внутри сферы радиуса  $1,33 Z^{-1/3} a_B$ .

Вычислим теперь полную энергию ионизации атома  $E_{tot}$  (необходимую, чтобы удалить все электроны). Кинетическая энергия электронов  $T$  есть сумма кинетических энергий отдельных электронов, она увеличивается в  $k^2$  раз при увеличении каждого из импульсов в  $k$  раз. Потенциальная энергия электронов  $V$  есть сумма кулоновских энергий взаимодействия электронов с ядром и друг с другом, она уменьшается в  $n$  раз при «растяжке» всех расстояний в  $n$  раз. Поэтому здесь по

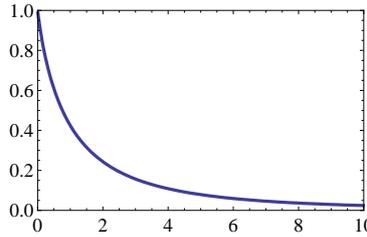


Рис. 11. Зависимость  $\chi(x)$ , здесь  $x = 1.13(r/a_B)Z^{1/3}$

<sup>1</sup>Величина  $Z^{-1/3}$  и составляет параметр малости задачи. В реальных атомах  $Z^{1/3} \leq 4, 5$ , т. е. речь идёт о разложении по малому параметру, большему 0,2.

теореме о вириале  $2\langle T \rangle = -\langle V \rangle$ . Следовательно,

$$E_{\text{tot}} \equiv -(\langle T + V \rangle) \equiv -\frac{1}{2}\langle V \rangle = -\frac{1}{2} \int \rho(r) \varphi(r) 4\pi r^2 dr = CZ^{7/3} \text{Ry},$$

$$C = \left( \frac{8\sqrt{2}}{3\pi} \right)^{1/6} \int_0^\infty \left( \frac{\chi^{5/2}}{\sqrt{x}} \right) dx \approx 1.53.$$

Экспериментальное значение составляет  $C \approx 1,18$ .

Условия применимости квазиклассического приближения выполняются только при  $a_B > r > a_B/Z$ . При меньших расстояниях потенциал меняется слишком быстро, при больших расстояниях дебройлевская длина волны электрона становится больше области изменения потенциала.

Уравнение Томаса–Ферми не учитывает обменного взаимодействия между электронами. Соответствующие поправки составляют величины порядка  $Z^{-2/3}$  от рассмотренных.

Простая модификация позволяет исследовать таким же способом ионизированные многозарядные атомы (см., например, [1]).

## § 15.2. 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 приведённой массе ядер в молекуле

$$\gamma = m/M \lesssim 10^{-4}. \quad (15.16)$$

Подчёркнём, 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.

### 15.2.1. Типы связей

◇ В случае *ионной связи* хорошо работает приближение, в котором один из атомов «отдаёт» свои электроны незаполненной внешней оболочки 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 определённым значением суммарного момента и спина. Направление суммарного момента задаёт 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  $\sigma$ - и  $\pi$ - 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 соединениях (например, в воде и в многих органических соединениях) реализуется ещё *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 тогда, когда во взаимодействии участвуют самые лёгкие атомы — атомы водорода.

◆ Уравнение Шредингера для стационарных состояний молекулы можно записать в виде

$$\left( \sum_{i=1}^n \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{j=1}^N \frac{\hat{p}_j^2}{2M_j} + V \right) \psi = E\psi. \quad (15.17)$$

Здесь  $i$  — номер электрона,  $j$  — номер ядра,  $V$  — 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 движением ядер. При этом ядерные координаты  $R_j$  входят в уравнение только как параметры потенциальной энергии  $V$ . Соответственно, мы ищем полную волновую функцию в виде

$$\psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j) = \varphi_{R_j}(\mathbf{r}_i)\chi(\mathbf{R}_j), \quad (15.18)$$

где электронная часть удовлетворяет уравнению

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \Delta_i + V(\mathbf{r}_i; R_j)\right) \varphi_{R_j}(\mathbf{r}_i) = U(\mathbf{R}_j)\varphi_{R_j}(\mathbf{r}_i). \quad (15.19)$$

При заданных положениях ядер  $R_j$  величина  $U(\mathbf{R}_j)$  получается как собственное значение энергии в уравнении (15.19). Если теперь мы подставим в (15.17) волновую функцию в виде (15.18) и учтем (15.19), то для ядерной части волновой функции  $\chi(\mathbf{R}_j)$  получается уравнение

$$\left(-\sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_j} \Delta_j + U(\mathbf{R}_j)\right) \chi(\mathbf{R}_j) = E\chi(\mathbf{R}_j). \quad (15.20)$$

### 15.2.2. 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 не очень больших молекул с характерным размером  $\bar{a}$ , полагая, что энергия  $U$  и её характерные изменения на масштабе  $\bar{a}$  определяются масштабом локализации.

*Колебательные уровни.* Для небольших отклонений от положений равновесия  $\mathbf{R}_{j0}$  разложение «потенциальной энергии» по отклонению начинается с квадратичных членов, и масштаб этой зависимости опре-

деляется размером  $\bar{a}$ . Поэтому

$$\Delta U(\mathbf{R}_j) \sim E_e \left( \frac{\Delta \mathbf{R}_j}{\bar{a}} \right)^2 = \frac{k_{eff}}{2} (\Delta \mathbf{R}_j)^2, \quad k_{eff} \approx \frac{\hbar^2}{m\bar{a}^4}.$$

Тогда энергии нормальных колебаний ядерной конфигурации

$$E_{osc} \sim \hbar \sqrt{\frac{k_{eff}}{M}} \sim \frac{\hbar^2}{\sqrt{mM}\bar{a}^2} \sim \sqrt{\frac{m}{M}} E_e = \sqrt{\gamma} E_e. \quad (15.21)$$

*Вращательные уровни.* Характерная энергия углового движения получается из (15.20), если считать все  $R_j \sim \bar{a}$ :

$$E_{rot} \sim \frac{\hbar^2}{M\bar{a}^2} \sim \frac{m}{M} E_e = \gamma E_e. \quad (15.22)$$

*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 задаётся соотношением вида (9.14) с заменой  $m \rightarrow M$  («ионный боровский 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  $\propto r^{-6}$  (силы Ван-дер-Ваальса, разд. 9.3.2), в этом случае качественный результат имеет тот же вид, но вычисления значительно более громоздки (задача 9.15 б).

Итак, найдем уровни энергии в системе с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2M} - \frac{e^2}{r} \left( 1 - \frac{a_M}{\gamma r} \right). \quad (15.23)$$

Это — стандартная задача о движении в центрально-симметричном поле. Здесь можно выполнить разделение переменных так, что волновая функция имеет стандартный вид  $\psi = R_\ell(r) Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$  (9.3) и её радиальная часть удовлетворяет радиальному уравнению Шредингера

с эффективным потенциалом

$$U_{\text{eff}} = -\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)/2M + e^2 a_M/\gamma}{r^2} \equiv \\ \equiv 2\text{Ry}(M) \left[ -\frac{a_M}{r} + \left( \ell(\ell+1) + \frac{1}{\gamma} \right) \frac{a_M^2}{r^2} \right].$$

Здесь через  $\text{Ry}(M) = \text{Ry}/\gamma$  обозначена характерная энергия системы, полученная из Ридберга  $\text{Ry}$  (15.16) заменой  $m \rightarrow M$ .

Получившееся уравнение для радиальной волновой функции совпадает с уравнением (9.15) для радиальной волновой функции кулоновской задачи с заменой величины  $\ell$  на новую величину  $\ell'$ , определяемую из уравнения

$$\ell'(\ell'+1) = \ell(\ell+1) + \frac{1}{\gamma} \Rightarrow \ell' = -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{\gamma} + \ell(\ell+1) + \frac{1}{4}}.$$

Теперь уровни определяются уравнением (9.19) с заменой  $\ell \rightarrow \ell'$ :

$$E_{n_r, \ell} = -\frac{\text{Ry}(M)}{(n_r + \ell' + 1)^2}. \quad (15.24)$$

Учёт малости  $\gamma$  позволяет последовательно выполнить разложения

$$\ell' = -1/2 + \sqrt{1/\gamma} [1 + (\gamma/2)(\ell(\ell+1) + 1/4)], \\ \frac{1}{(n_r + 1 + \ell')^2} = \left( \frac{\sqrt{\gamma}}{(n_r + \frac{1}{2})\sqrt{\gamma} + 1 + (\gamma/2)(\ell(\ell+1) + 1/4)} \right)^2 = \\ = \gamma \left( 1 - 2\sqrt{\gamma}(n_r + \frac{1}{2}) - \gamma(\ell(\ell+1) + 1/4) \right).$$

Учитывая ещё, что  $\text{Ry}(M) = \text{Ry}/\gamma$ , получаем окончательно

$$E_{n_r, \ell} = -\text{Ry}(1 - \gamma/4) + 2\sqrt{\gamma} \text{Ry} \cdot \left( n_r + \frac{1}{2} \right) + \gamma \text{Ry} \cdot \ell(\ell+1). \quad (15.25)$$

Первое слагаемое даёт начало отсчёта энергии. Второе слагаемое  $2\sqrt{\gamma} \text{Ry} \cdot \left( n_r + \frac{1}{2} \right)$  описывает такую же систему уровней, как у гармонического осциллятора с частотой  $\omega = 2\sqrt{\gamma} \text{Ry}/\hbar$  — это *колебательные*

уровни радиального движения. Третье слагаемое  $\gamma R\gamma \cdot \ell(\ell + 1)$  описывает систему вращательных уровней сферического волчка с моментом инерции  $I = \hbar^2/(2\gamma R\gamma)$ , это — *вращательные уровни*. Легко видеть, что для этих уровней реализуются оценки (15.21) и (15.22).

◇ Поскольку характерный размер молекулы  $\bar{a}$  — порядка нескольких Å, 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 ещё в 100 раз, их частоты попадают в далекую инфракрасную область. Здесь расстояния между уровнями сравниваются с их радиационными ширинами и тепловым (доплеровским) уширением. Поэтому в некоторых молекулярных газах вместо отдельных тонких линий наблюдаются целые спектральные полосы (полосатые спектры).

### § 15.3. Атомное ядро. Ядерные силы

Наиболее известная ядерная «элементарная» частица — протон — представляет собой ядро атома водорода. Протон заряжен положительно, по величине его заряд равен заряду электрона. Спин протона равен  $1/2$  (как и у электрона). Протон в 1836 раз тяжелее электрона. Вместо массы мы приведём значение его энергии покоя  $m_p c^2 = 938,27$  МэВ, величина собственного магнитного момента протона составляет  $2,79e\hbar/(2m_p c)$ , он направлен вдоль спина протона.

Атомные ядра состоят из протонов и нейтронов. Нейтрон — нейтральная частица со спином  $1/2$ . Его масса лишь ненамного больше массы протона,  $m_n c^2 = 939,57$  МэВ. Это различие несущественно при описании большинства свойств ядер, однако его хватает для того, чтобы свободный нейтрон был нестабилен, он распадается на протон, электрон и нейтрино  $n \rightarrow p + e + \bar{\nu}$ , со временем жизни 886 с (*это — наиболее известное проявление слабого взаимодействия*). Нейтрон имеет собственный магнитный момент, направленный навстречу его спину, его величина составляет  $-1,91e\hbar/(2m_n c)$ . Нейтроны и протоны вместе называют *нуклонами*.

Атомное ядро характеризуется полным числом нуклонов в ядре  $A$  (*атомным весом*) и *атомным номером*  $Z$ , который равен его заряду (в единицах заряда электрона), т.е. и числу протонов в ядре; число нейтронов в ядре есть  $N = A - Z$ . Ядра с одинаковым значением  $Z$ , но

разными  $A$  называют *изотопами*. Ядра часто обозначают как  ${}^A_Z T$  (или просто  ${}^A T$ ), где  $T$  — название элемента, например,  ${}^{16}_8 O$  (или  ${}^{16} O$ ) — изотоп кислорода ( $Z = 8$ ) с атомным весом 16. Существующие в природе химические элементы представляют собой смеси изотопов. В обычной таблице Менделеева представлены средние по природному составу изотопов значения атомных весов элементов. Атомные ядра с одинаковым значением атомного веса  $A$ , но разными значениями  $Z$  называют *изобарами*. С учётом изотопов известно 285 стабильных и долгоживущих ядер. К концу 2008 г. установлено существование элементов со всеми  $Z \leq 111$ , для них  $A \leq 272$ , некоторые группы исследователей докладывали об открытии элементов с  $Z = 112, 114, 116, 118$  и  $A$  вплоть до 293. Самые тяжёлые элементы нестабильны (радиоактивны), и потому в природе не существуют. Наиболее тяжёлым из наблюдающихся в природе элементов является уран  ${}^{238}_{92} U$ . Он нестабилен, время его жизни составляет 6,45 млрд лет.

Ядерное притяжение обуславливает существование *энергии связи* ядра  $W(A, Z)$  — той минимальной энергии, которая необходима, чтобы развалить ядро на нуклоны. Масса ядра  $M = Zm_p + Nm_n - \Delta M$ , где *дефект массы*  $\Delta M$  связан с энергией связи соотношением Эйнштейна  $\Delta M = W(A, Z)/c^2$ .

Исследования атомных ядер и соударений ядерных частиц показали, что взаимодействия между ними определяются следующими видами сил.

- **Ядерные (сильные) взаимодействия** определяют притяжение нуклонов друг к другу, обеспечивающее устойчивость ядер.

*В ядерных взаимодействиях чётность сохраняется.*

При описании ядерных взаимодействий плодотворным оказалось введение понятия *изотопического спина* — *изоспина* — специальной внутренней степени свободы, реализующейся в абстрактном *изотопическом пространстве*, не связанном с пространством обычных координат. В этом пространстве изоспина описываются теми же операторами, что момент импульса и спин, они складываются так же, как складываются обычные моменты импульса. Зарядовые состояния частиц определяются проекцией изоспина на «изотопическую ось  $z$ ».

В этом подходе протоны и нейтроны — разные воплощения одной элементарной частицы — нуклона, с изоспином  $1/2$  так, что протон —

это состояние нуклона с проекцией изоспина на изотопическую ось  $z$ , равной  $+1/2$ , а нейтрон — состояние нуклона с проекцией изоспина на изотопическую ось  $z$ , равной  $-1/2$ . Существуют и антинуклоны, антипротон с проекцией изоспина на изотопическую ось  $z$ , равной  $-1/2$ , и антинейтрон — состояние антинуклона с проекцией изоспина на изотопическую ось  $z$ , равной  $1/2$ . В соответствии с правилами сложения моментов, полный изоспин ядра лежит в пределах  $(A/2, (N - Z)/2)$ .

Состояния  $\pi$ -мезона с зарядами  $+e, 0, -e$  (их обозначают  $\pi^+, \pi^0, \pi^-$ ) можно рассматривать как состояния одной частицы — пиона — с проекциями изотопического спина на изотопическую ось  $z$ , равными  $1, 0$  и  $-1$  соответственно. Поэтому принимают, что изотопический спин пиона равен  $1$ .

При столкновении ядерных частиц происходят их взаимопревращения, рождаются пионы, нуклоны, антинуклоны и другие частицы.

*Ядерные взаимодействия одинаковы для любого набора частиц, различающихся только проекциями изоспина (изотопическая инвариантность). В этих взаимодействиях изотопический спин сохраняется.*

Изотопическая инвариантность означает, в частности, что угловые и энергетические зависимости для реакций  $\pi^+ + p \rightarrow \pi^+ + p$  и  $\pi^- + n \rightarrow \pi^- + n$  одинаковы. Вообще 6 разных состояний пары (пион + нуклон) можно классифицировать по значениям полного изотопического спина системы  $3/2$  (4 состояния) и  $1/2$  (2 состояния) — по правилам сложения момента, как это было сделано в § 12.1. Изотопическая инвариантность означает, что все 10 допускаемых законом сохранения заряда переходов пары (пион + нуклон) друг в друга являются простыми суперпозициями всего двух амплитуд, с полным изоспином  $3/2$  и  $1/2$ . Зарядовая независимость ядерных взаимодействий означает, что 10 подобных переходов для античастиц описываются точно теми же двумя амплитудами.

Ядерное взаимодействие оказалось **короткодействующим**. Это короткодействие обеспечивает явление *насыщения* в ядре — каждый нуклон взаимодействует лишь с конечным числом нуклонов окружения.

**Пионная теория.** Для объяснения основных свойств ядерных сил Х. Юкава в 1934 г. предложил *пионную теорию ядерных сил*. Согласно этой теории, взаимодействия между нуклонами переносятся не наблюдавшимися в то время частицами —  $\pi$ -мезонами (пиона-

ми) наподобие того, как электромагнитные взаимодействия переносятся фотонами. Пион был открыт только в 1947 г. В точном соответствии с предсказаниями Юкавы оказалось, что пионы имеют массу  $m_\pi \approx 130 \text{ МэВ}/c^2$  и наблюдаются в состояниях с зарядами  $\pm e$  и 0, их обычный спин равен нулю, а изотопический спин равен 1, это — псевдоскалярные частицы с массой  $m_\pi$  (псевдоскалярные — значит, что при отражении координат их волновая функция меняет знак, а при вращениях не меняется).

В этой теории элементарное статическое взаимодействие между нуклонами в очень грубом приближении описывается потенциалом (Юкавы)

$$V = g \frac{e^{-r/r_0}}{r}, \quad r_0 = \frac{\hbar}{m_\pi c} \sim 1,5 \text{ Фм} = 1,5 \cdot 10^{-13} \text{ см.} \quad (15.26)$$

В отличие от электродинамики, где постоянная тонкой структуры  $\alpha = e^2/(\hbar c) = 1/137$  мала по сравнению с 1 (что и обеспечивает применимость теории возмущений при описании электромагнитных явлений), для ядерного взаимодействия оказалось, что  $g^2/(\hbar c) \approx 15$ . Именно поэтому это взаимодействие называют **сильным**, здесь теория возмущений обычно неприменима. Для описания наблюдаемых явлений в некоторых областях параметров используют разные **феноменологические модели**, некоторые из которых упоминаются ниже.

Тождественность нуклонов приводит к появлению обменных сил (разд. 13.2), т. е. к зависимости энергии взаимодействия от суммарного спина и суммарного изоспина нуклонов. Эффективный потенциал взаимодействия между нуклонами (используемый для оценок с помощью теории возмущений) зависит и от ориентации их спинов по отношению к  $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$  (тензорные силы). Грубые оценки можно делать, представляя потенциал ядерных сил в виде прямоугольной центрально-симметричной ямы глубиной 40 МэВ и радиусом 2 Фм (ср. задачу 2. 10).

В конце 1960-х годов возникло понимание, что пионная теория ядерных сил тоже является феноменологической моделью, описывающей проявления более фундаментальной теории — **квантовой хромодинамики (КХД) — теории взаимодействия кварков и глюонов**, описывающей взаимодействия на масштабах меньше ядерных.

- **Электромагнитное взаимодействие** хорошо знакомо по предыдущим главам и по другим курсам. Оно *сохраняет чётность, но нарушает изотопическую симметрию*, оставаясь значительно слабее

ядерного. Здесь основную роль играют заряды и магнитные моменты частиц и их внутренняя электромагнитная структура — формфакторы (см. разд. 18.3.5). Это — дальнедействующее взаимодействие, здесь силы очень медленно убывают с расстоянием, это выражается, например, в том, что поток индукции поля точечного заряда в вакууме через окружающую его замкнутую поверхность не меняется с ростом расстояния от заряда до этой поверхности. При описании электромагнитного взаимодействия удобным инструментом является теория возмущений.

• Наконец, за нестабильность нейтрона отвечает **слабое взаимодействие**, которое при описании ядерных явлений можно считать точечным (его радиус — около  $10^{-17}$  см) и очень слабым. *В слабых взаимодействиях чётность и изоспин не сохраняются.*

Все эти взаимодействия сохраняют *барионный заряд* — число нуклонов минус число антинуклонов, обеспечивая стабильность протона.

### 15.3.1. Модели строения ядра

#### Капельная модель, формула Вайцеккера

Свойство насыщения ядерных сил делает ядро похожим на каплю жидкости. В этой модели типичное ядро — сфера радиуса

$$R = (1,2A^{1/3} - 0,5) \Phi_M \quad (15.27)$$

(здесь и далее все цифры получены подгонкой экспериментальных данных). Капельная модель хорошо описывает значения энергии связи ядер в основном состоянии. Её можно записать (Вайцеккер, 1935 г.) в виде суммы (положительное значение отвечает притяжению):

$$W(A, Z) = E_{об} + E_{пов} + E_{кул} + E_{сим} + E_{спар}. \quad (15.28a)$$

∇ Основной член в сумме — *объёмная энергия*  $E_{об}$  пропорциональна числу нуклонов в ядре (объёму ядра),  $E_{об} = a_V A$ , где  $a_V = 15,75$  МэВ.

∇ Как и молекулы в обычной капле, нуклоны на поверхности связаны слабее, чем внутри ядра, это обуславливает существование *поверхностной энергии*, которая пропорциональна площади поверхности ядра  $S = 4\pi R^2 \propto A^{2/3}$ . Увеличение площади поверхности энергетически невыгодно, и  $E_{пов} = -a_S A^{2/3}$ , где  $a_S = 17,1$  МэВ.

∇ *Кулоновское отталкивание* уменьшает энергию связи. Эта энергия оценивается как энергия заряда, равномерно распределённого

внутри сферы радиуса  $R$ , это

$$E_{\text{кул}} = -a_C Z^2 A^{-1/3}, \quad a_C = (3/5)e^2/r_0 = 0,71 \text{ МэВ}.$$

Относительная роль кулоновского отталкивания возрастает в тяжёлых ядрах, где оно становится вторым по величине эффектом в энергии связи. Кулоновское отталкивание делает невозможным существование ядер с  $Z \gtrsim 170$ .

▽ *Энергия симметрии.* Нуклоны в ядре занимают низшие возможные уровни энергии. В силу принципа Паули, в отсутствие вырождения в каждом квантовом состоянии может находиться не более двух протонов и не более двух нейтронов (спины по  $1/2$ ). Если, например, число нейтронов  $N = A - Z$  больше числа протонов  $Z$ , то «лишние» нейтроны выталкиваются в состояния с большей энергией, что уменьшает энергию связи. Минимальное значение этого вклада в энергию достигается при  $N = Z$ . Поэтому соответствующий вклад в энергию связи пропорционален  $(N - Z)^2$ . Коэффициент пропорциональности — это характерное расстояние между уровнями энергии ядра, которое называется пропорциональным  $1/A$ . В итоге  $E_{\text{сим}} = -a(A - 2Z)^2/A$ , где  $a = 23,7$  МэВ. Вместе с кулоновским отталкиванием эта энергия определяет оптимальное соотношение числа протонов и нейтронов в ядре.

▽ Взаимодействие нуклонов в ядре приводит к образованию пар: в основном состоянии ядра два нуклона одного типа (два протона или два нейтрона) образуют пару с энергией связи  $\varepsilon \approx 1 \div 3$  МэВ и *нулевым суммарным спином*. В связи с этим определяются чётно-чётные ядра (с чётными числами протонов  $Z$  и нейтронов  $N$ ), нечётные ядра (в которых  $A = N + Z$  нечётно) и нечётно-нечётные ядра (с нечётными  $Z$  и  $N$ ). Зависимость от размеров ядра описывается аппроксимацией экспериментальных данных как  $A^{-3/4}$ . Энергия спаривания отсчитывается от значения для нечётных ядер,  $E_{\text{спар}} = \pm \delta A^{-3/4}$  со знаком «+» для чётно-чётных ядер и знаком «-» для нечётно-нечётных ядер,  $\delta = 34$  МэВ. Это слагаемое даёт компактное описание тому факту, что из 285 стабильных и долгоживущих ядер почти 60% (167) являются чётно-чётными и только 8 нечётно-нечётными.

Для дальнейших обсуждений представляет интерес удельная энергия связи (приходящаяся на один нуклон):

$$\varepsilon(A, Z) \equiv \frac{W(A, Z)}{A} = 15,75 - 17,8 A^{-1/3} - 0,71 Z^2 A^{-4/3} - \quad (15.28b) \\ - 23,7(1 - 2Z/A)^2 + 17[(-1)^N + (-1)^Z] A^{-7/4} \text{ МэВ} .$$

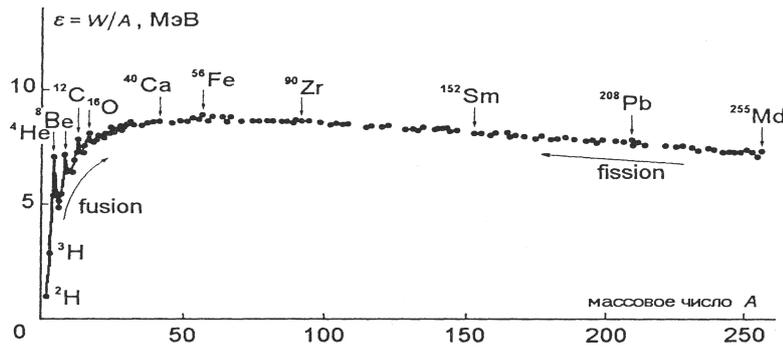


Рис. 12. Удельная энергия связи для стабильных и долгоживущих ядер

Реализующиеся для стабильных и долгоживущих ядер значения этой удельной энергии изображены на рис. 12.1. Некоторым значениям  $A$  отвечает несколько точек, соответствующих изобарным ядрам.

Отметим, что при учёте только объёмного слагаемого и энергии симметрии наиболее энергетически выгодным было бы, чтобы числа нейтронов и протонов совпадали. Однако кулоновское отталкивание, относительная роль которого с ростом  $Z$  возрастает, делает более выгодными состояния с избытком нейтронов. Именно поэтому для лёгких ядер обычно  $A \approx 2Z$ , а для тяжёлых ядер  $A > 2Z$ . В частности, для ядра  $U$  оказывается  $A > 2,5Z$ .

◇ Некоторые свойства тяжёлых ядер объясняются предположением, что их форма отклоняется от сферической, при этом значение поверхностной энергии  $E_{\text{пов}}$  увеличивается по сравнению с выражением в (15.28b). **Деление тяжёлого ядра при бомбардировке нейтронами** было понято как двухступенчатый процесс. Сначала нейтрон поглощается и возникает возбуждённое вытянутое ядро (вытянутая капля). Затем это ядро распадается на две приблизительно одинаковые почти сферические капли с вылетом лишних нейтронов (подобно брызгам).

**Оболочечная модель.** Более детально состояния ядра описываются оболочечной моделью, идейно сходной с описанием строения атома с последовательным заполнением оболочек. На первый взгляд, такая аналогия не должна иметь места в силу серьёзного различия между относительно слабым дальнедействующим кулоновским взаи-

модействием электронов и близкодействующим сильным взаимодействием нуклонов. Важнее, однако, другое. Так же, как и для электрона в атоме, можно считать, что каждый нуклон в отдельности движется в эффективном самосогласованном центральном поле  $V_n(r)$ , создаваемом остальными нуклонами. Оказывается, что можно подразделить движения на *медленное* движение коллектива нуклонов в целом и *быстрое* движение отдельного нуклона относительно этого коллектива. Отклонение энергии взаимодействия отдельного нуклона с остальными от энергии его движения в эффективном самосогласованном поле (энергия быстрого движения) невелико, и это обуславливает эффективность рассматриваемой ниже картины.

Форма эффективного потенциала  $V_n(r)$  подбиралась на основе анализа экспериментальных данных. Удовлетворительное качественное описание дают и прямоугольная потенциальная яма, и осцилляторный потенциал, но наилучшее количественное согласие даёт потенциал Вудса–Саксона (значения  $R$  — в (15.27))

$$V_n(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{(r-R)/a}}, \quad \begin{cases} V_0 \approx 40 \text{ МэВ}, \\ a = 0,55 \text{ Фм}. \end{cases} \quad (15.29)$$

Так же, как и в атоме, в ядре существенную роль играет спин–орбитальное взаимодействие, но для ядер энергия этого взаимодействия лишь немногим меньше энергии движения в самосогласованном поле. В итоге энергия нуклона в ядре выражается через полный орбитальный момент ядра  $L$  и его полный спин  $S$ :

$$V(r) = V_n(r) + V_2(r)\hat{L}\hat{S}, \quad (15.30)$$

В поле  $V_n(r)$  отсутствует дополнительное вырождение, свойственное кулоновскому случаю, значения энергий, отвечающие разным  $L$ , различны. Однако численный расчёт показывает, что уровни энергии разделяются на близко расположенные группы. Это и есть *ядерные оболочки*, которые заполняются в соответствии с принципом Паули по той же схеме, что и в случае атома. Числа нейтронов или протонов в заполненных оболочках называют *магическими*, это

$$N_M = 2, 8, 20, 50, 82, 126.$$

Ядра, у которых числа нейтронов и (или) протонов равны  $N_M$ , наиболее устойчивы и распространены в природе, особенно выделяются здесь *дважды магические* ядра, у которых магическим является и число протонов и число нейтронов.

- **Возбуждённые состояния ядер** распадаются, излучая фотоны ( $\gamma$ -распад). Спектр энергий этих фотонов даёт уровни энергии возбуждённого ядра.

*Однонуклонные возбуждения* ядер рассчитывают в рамках оболочечной модели, они подобны возбуждённым состояниям атома. Однако из-за сильного взаимодействия между нуклонами существенную роль играют также *многочастичные возбуждения*. Среди них особую роль играют  *$\alpha$ -частичные возбуждения*, позволяющие говорить о наличии в ядре  $\alpha$ -частиц — дважды магических ядер атома *He*. Наконец, для тяжёлых ядер становятся возможными *возбуждения, отвечающие отклонениям их формы от сферичности*.

### 15.3.2. Ядерные распады

- **$\alpha$ -распад.** В тяжёлых ядрах нередко оказывается, что масса ядра  $M(A, Z)$  больше суммы масс ядра, у которого на 2 протона и на 2 нейтрона меньше  $M(A - 4, Z - 2)$  и массы  $\alpha$ -частицы (ядра атома *He*)  $M(4, 2)$ :

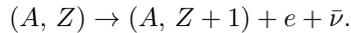
$$M(A, Z) > M(A - 4, Z - 2) + M(4, 2).$$

В этом случае  $\alpha$ -частичные возбуждения играют существенную роль, и ядро распадается с вылетом  $\alpha$ -частицы,  $(A, Z) \rightarrow (A - 4, Z - 2) + \alpha$  ( $\alpha$ -радиоактивность). Такой распад описан в приложении. F.2.2. В этом распаде связь между временем жизни ядра и энергией  $\alpha$ -частицы  $E$  в хорошем приближении имеет вид универсального *закона Гейгера-Нетолла* (6.17). Согласно этому закону и в согласии с опытом, при увеличении  $E$  от 4 до 9 МэВ время жизни падает с  $10^{20}$  лет до  $10^{-5}$  с.

- **$\gamma$ -распад** обусловлен электромагнитным взаимодействием. В процессе ядерных превращений ядро может оказаться в возбуждённом состоянии. Такие ядра распадаются, излучая фотоны, как это обсуждается ниже, в гл. 17. При этом вероятность перехода сильно зависит от различия в моменте и чётности начального и конечного состояний (ср. правила отбора в § 17.3). Вплоть до энергий перехода  $\sim 10$  МэВ длина волны фотона велика по сравнению с размером типичного ядра, и вероятности электрических переходов, отличных от электрического дипольного, подавлены в  $(R/\lambda)^{2(\Delta J - 1)}$  раз, а магнитных — в  $(R/\lambda)^{2\Delta J}$  раз (ср. оценки (17.19)).

- **$\beta$ -распад и  $K$ -захват** обусловлены слабым взаимодействием. Если энергия ядра  $M(A, Z)$  превосходит энергию изобарного ядра с

большим числом протонов  $M(A, Z + 1)$  более, чем на массу электрона,  $M(A, Z) > M(A, Z + 1) + m_e$ , то ядро  $\beta$ -радиоактивно, т. е. распадается с вылетом электрона и (безмассового) нейтрино,



Освобождающаяся в  $\beta$ -распаде энергия  $\Delta E$  меняется от 18,61 КэВ для трития  ${}^3_1\text{H}$  до 13,4 МэВ для  ${}^{15}_5\text{B}$ . Эти распады обусловлены слабым взаимодействием. Поэтому соответствующие времена жизни  $\tau$  очень велики. По порядку величины  $\tau \sim (\hbar c / (\alpha \Delta E)) \cdot (M_W c^2 / \Delta E)^4$ , где  $M_W c^2 = 80$  ГэВ — энергия покоя  $W$ -бозона — переносчика слабых взаимодействий.

То же самое слабое взаимодействие в некоторых ядрах приводит к позитронному  $\beta$ -распаду  $(A, Z) \rightarrow (A, Z - 1) + e^+ + \nu$  при  $M(A, Z) > M(A, Z - 1) + m_e$  или — при  $M(A, Z) + m_e > M(A, Z - 1)$  — к  $K$ -захвату атомного электрона, обычно с самой низкой атомной оболочки  $(A, Z) + e \rightarrow (A, Z - 1) + \nu$ .

• **Деление тяжёлого ядра** на более лёгкие ядра примерно одинаковой массы, при таком распаде выделяется значительная энергия (см. рис. 12.1). Поскольку у тяжёлых ядер нейтронный избыток  $N - Z \equiv A - 2Z$  больше, чем у лёгких, при таком распаде вылетает также несколько нейтронов (обычно 2–3). Этот процесс спонтанно развивается только у самых тяжёлых ядер, соответствующие времена жизни очень велики ( $\sim 10^{15}$  лет и больше). В большинстве случаев такой распад происходит после предварительного поглощения медленного нейтрона (вынужденный распад).

### 15.3.3. Использование ядерной энергии

**Реакция деления тяжёлого ядра** — основа работы обычных ядерных реакторов и атомной бомбы. Здесь используется тот факт, что для самых тяжёлых ядер из-за кулоновского отталкивания энергия связи, приходящаяся на нуклон, меньше, чем для ядер со средними массами (см. рис. 12.1). По-видимому, один природный ядерный реактор работал на Земле в Африке в доисторические времена.

**Термоядерный синтез изотопов водорода** в He и более тяжёлые ядра использует тот факт, что при этом выделяется значительная энергия (см. рис. 12.1). Термоядерный синтез составляет основу энер-

гии звёзд, водородной бомбы и — мы надеемся — будущего термоядерного энергетического реактора.

### § 15.4. Задачи

1. Рассматривается двумерный заряженный симметричный осциллятор. Найти расщепление его уровней под влиянием магнитного поля.
2. Измеренное значение энергии полной ионизации атома гелия (энергия, необходимая, чтобы оторвать оба электрона) составляет 5,8 Ry. Определить энергию однократной ионизации этого атома.
3. Рассмотрите атом гелия, разд. 15.1.3. Докажите, что полный орбитальный момент и полный спиновый момент системы двух электронов коммутируют с гамильтонианом, т.е. являются интегралами движения. Рассматривая взаимодействие между электронами как возмущение, рассчитайте энергетические уровни для конфигурации  $1s2s$  и убедитесь в том, что благодаря обменному взаимодействию энергия триплетного термина ниже энергии синглетного термина.
4. Указать все 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 сверхтонкое расщепление основного состояния атома водорода, вычисляя магнитное поле электрона в районе ядра  $B(0)$ .
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  $U = C \hat{J}_1 \hat{J}_2$ . Найти спектр стационарных состояний. Определить кратности вырождения. При  $J = 5$  найти среднее значение  $\hat{\mu}_z = \mu_B (g_1 \hat{J}_{1z} + g_2 \hat{J}_{2z})$ .
11. Какое магнитное поле действует на ядро со стороны электрона в состоянии  $|n, \ell, \ell_z, j_z\rangle$ ?

12. Найти сдвиги уровней в магнитном поле в состояниях
- $|J, M, L, S\rangle$ ,
  - $|L, m_\ell, S, M_S\rangle$ ,
  - $|J, M, J_1, J_2\rangle$ ;  $\hat{\mu}_z = \mu_B(g_1\hat{J}_{1z} + g_2\hat{J}_{2z})$ .
13. Атомная система имеет полный момент  $L$  и полный спин  $S$ . Найти число уровней тонкой структуры. На сколько уровней расщепится каждый из уровней тонкой структуры в слабом магнитном поле? Каково число состояний магнитного расщепления в случае сильного магнитного поля? На сколько уровней расщепляется каждое из этих состояний из-за спин-орбитального взаимодействия? Указать порядки величины энергий этих расщеплений в каждом из случаев.
14. Оцените поправки к уровням энергии атома водорода, обусловленные взаимодействием магнитных моментов электрона и ядра (*сверхтонкое расщепление*).
15. Найти возможные состояний атома гелия, в случае когда один электрон находится в состоянии  $|2, 1, 0\rangle$ , а другой — в состоянии  $|3, 2, 0\rangle$ . С помощью теории возмущений и вариационного метода (наподобие того, как это было сделано в разд. 15.1.3) определить энергии этих состояний. Воспользоваться соотношением (В.20).
16. Оценки в модели Томаса–Ферми:
- Найти зависимость от  $Z$  для среднего и среднеквадратичного расстояний электрона от ядра.
  - Найти распределение электронов по импульсам. Найти зависимость от  $Z$  средней кинетической энергии электрона.
17. 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 учётом разных значений проекции полного момента)?

## Глава 16

# Системы с гамильтонианом, зависящим от времени

Ниже 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.

### § 16.1. Постановка вопроса

Если гамильтониан зависит от времени, решавшиеся ранее задачи об отыскании стационарных состояний и их эволюции теряют смысл. Решения требуют совсем другие задачи. Обсудим общую постановку вопроса для большинства таких ситуаций.

∇ Пусть до «начала событий» система описывалась гамильтонианом  $\hat{H}_i$  ( $i$  — initial) с собственными состояниями  $|k\rangle_i$  и уровнями энергии  $E_{ik}$ . Ниже мы различаем вектор  $|k\rangle_i$  — не зависящее от времени решение стационарного уравнения Шредингера с гамильтонианом  $\hat{H}_i$ , и зависящий от времени вектор  $|k(t)\rangle_i$  — решение полного уравнения Шредингера с тем же гамильтонианом и той же энергией:

$$i\hbar \frac{d|k(t)\rangle_i}{dt} = \hat{H}_i |k(t)\rangle_i, \quad |k(t)\rangle_i = |k\rangle_i e^{-iE_{ik}t/\hbar}. \quad (16.1)$$

∇ Начиная с момента  $t = t_0$  гамильтониан начал меняться под действием *возмущения*  $\hat{V}(t)$  (часто принимают  $t_0 = 0$  или  $t_0 = -\infty$ ):

$$\hat{H}_i \rightarrow \hat{H} = \hat{H}_i + \hat{V}(t), \quad \hat{V}(t < t_0) = 0. \quad (16.2)$$

∇ «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  $|r\rangle_f$  и  $|r(t)\rangle_f$  и уровнями энергии  $E_{rf}$  ( $f$  — final).

Такая постановка задачи отвечает представлению о том, что «до начала событий», при  $t < 0$  система очень долго оставалась неизменной, например, в одном из состояний  $|i\rangle$ . Сверх того, фактически предполагается, что «после конца событий» система также остаётся неизменной в течение очень долгого времени.

В обсуждаемом процессе энергия не сохраняется, стационарных состояний нет.

$$\boxed{\text{Основная задача — найти вероятности переходов из начального состояния } |k\rangle_i \text{ в одно из состояний } |r\rangle_f.} \quad (16.3)$$

Если начальная и (или) конечная система сильно вырождены, постановка задачи может потребовать дальнейших уточнений.

Акт наблюдения за системой в промежуточный момент времени необратимо изменил бы её, результат последующей эволюции исказился бы. В отсутствие такого наблюдения, ответ на вопрос, *что случилось с системой «по дороге» из  $|k\rangle_i$  в  $|r\rangle_f$*  может *выглядеть* совершенно по-разному при разных методах решения задачи, ибо этот ответ не содержит измеримой информации, относящейся к изучаемому процессу.

Так, при словесном описании эволюции может оказаться удобным использование понятий, описывающих промежуточное состояние. Примером является понятие о *виртуальных частицах* при описании процессов с элементарными частицами или в статистических системах. На таком языке строятся рассказы о промежуточных этапах эволюции. Другие способы описания промежуточных этапов эволюции могут интерпретироваться совсем по-другому. В разных методах решения даже последовательность переходов между виртуальными состояниями может быть различной. Содержательный вопрос касается только сопоставления картин «до начала событий» и «после конца событий». Разумеется, ответ на этот вопрос не зависит от способа описания.

■ Специальный случай представляет исследование систем с периодически меняющимся гамильтонианом. Примером является поведение системы в поле плоской электромагнитной волны в случае, когда действие этой волны продолжается значительно дольше, чем время элементарных процессов в системе. Для таких явлений полезным является понятие **квазиэнергии**, определяемое по аналогии с понятием квазиимпульса периодической решётки. Исследование таких явлений выходит за рамки курса.

## § 16.2. Уравнение Шредингера в представлении взаимодействия

Принято искать решения уравнения Шредингера  $|\alpha(t)\rangle$  в виде разложения по собственным функциям исходного гамильтониана  $\hat{H}_i$  (16.1):

$$i\hbar \frac{\partial |\alpha(t)\rangle}{\partial t} = (\hat{H}_i + \hat{V}(t)) |\alpha(t)\rangle, \quad |\alpha(t)\rangle = \sum_k a_k(t) |k(t)\rangle_i. \quad (16.4)$$

Подставим это разложение в приведённое здесь уравнение Шредингера. Производная по времени от множителя  $|k(t)\rangle_i$  в левой части уравнения даёт вклад, компенсирующий  $\hat{H}_i |k(t)\rangle_i$  в правой части. Умножая после этого результат слева на  ${}_i\langle m(t)|$  и выполняя усреднение, получим уравнение Шредингера в представлении взаимодействия (§ 3.4):

$$i\hbar \frac{da_m}{dt} = \sum_k V_{mk}^t(t) a_k(t), \quad (16.5)$$

$$V_{mk}^t(t) = {}_i\langle m(t)|\hat{V}(t)|k(t)\rangle_i \equiv V_{mk}(t) e^{i\omega_{mk}t}, \quad \omega_{mk} = \frac{E_{mi} - E_{ki}}{\hbar}.$$

Это уравнение показывает, во что переходят состояния «старого» базиса  $|k\rangle_i$  под действием нашего возмущения. Подчеркнём, 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  $\hat{U}_0$  (3.1а), (3.2) так же, как получались операторы физических величин (3.6) в гайзенберговской картине.)

∇ Обычно в качестве начального берут одно из стационарных состояний исходной системы  $|n\rangle_i$ . 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  $|\psi\rangle$  (16.4), получающегося в этом случае, мы используем специальное обозначение  $|n_V^t\rangle$ :

$$|n_V^t(t)\rangle = \sum_k a_{k(n)}(t) |k(t)\rangle_i, \quad (|n_V^t(t=0)\rangle = |n\rangle_i). \quad (16.6)$$

◇ Амплитудами перехода называют коэффициенты разложения этого вектора по собственным векторам конечного состояния,

$$A_{mn} \equiv A_{m(f)n(i)} = {}_f\langle m(t); |n_V^t(t)\rangle \Big|_{t \rightarrow \infty}. \quad (16.7a)$$

Вероятности перехода получаются отсюда стандартным образом:

$$w_{mn} = |A_{mn}|^2. \quad (16.7b)$$

◇ При описании переходов в непрерывный спектр физический интерес представляет вероятность перехода из состояния  $|k\rangle_i$  не в одно состояние  $|r\rangle_f$ , но в целую группу близких состояний. Соответствующее изменение постановки задачи обсуждается в § 16.5.

• **Применимость подхода.**

1. Продемонстрированный подход удобен для задач, в которых «после событий» возмущение выключается, и форма гамильтониана восстанавливается<sup>1</sup>, т. е. набор  $\{|k\rangle_f\}$  совпадает с набором  $\{|k\rangle_i\}$ .

Если возмущение  $V(t)$  обладает некоторой периодичностью (например, при изучении действия электромагнитной волны на систему) появляются дополнительные вопросы. Если включение возмущения является мгновенным, то результат зависит от значения фазы в момент включения — как бы ни долговременно было воздействие возмущения. Обычно содержательными являются вопросы о результатах, слабо зависящих от начальной фазы, или об организации такой модуляции сигнала, при которой эта зависимость становится слабой.

2. Если возмущение приводит к конечному изменению гамильтониана «после событий», но пространство состояний не меняется, аккуратность требует небольшого изменения процедуры, охарактеризованной в предыдущем случае, см. пример **B** на стр. 350.

3. Трудный для анализа случай имеет место, если после действия возмущения возникает новая система, с новым пространством состояний. Он обсуждается в Приложении D.

Задачи о распаде ядер, ионизации и т. п. требуют дополнять первоначальное гильбертово пространство новыми состояниями, возникающими после распада.

4. При долговременном периодическом воздействии иногда можно иметь в виду мгновенные выключения этого взаимодействия в некоторый момент времени. Это *выглядит* как наблюдение за системой в

<sup>1</sup>В частности, часто принимают, что в кристалле при  $t \rightarrow -\infty$  электроны были не взаимодействующими, затем включилось взаимодействие их друг с другом и с колебаниями решётки (с фононами), а при  $t \rightarrow \infty$  взаимодействие выключается. Физически осмысленны те результаты, которые не зависят от законов включения и выключения этого взаимодействия (в широком интервале их видоизменения).

процессе воздействия. При этом осмысленными могут оказаться вопросы об эволюции какого-то параметра со временем, о том, какое состояние в среднем будет появляться чаще других при избранном способе выключения поля и т. д.

### § 16.3. Теория возмущений

Во многих случаях возмущение  $\hat{V}(t)$  таково, что под его действием невозмущённое решение меняется «не очень сильно», т. е.  $|a_k(t) - \delta_{kn}| \ll 1$ . В этом случае для решения возникающих задач применима теория возмущений. Как и в гл. 5, удобно ввести в возмущение множитель  $\varepsilon$  и иметь в виду разложение коэффициентов  $a_{k(n)}$  по степеням  $\varepsilon$ . Рассуждения проводятся при  $\varepsilon \rightarrow 0$ , а в конечном результате полагают  $\varepsilon = 1$ , говоря, что возмущение  $\hat{V}(t)$  является малым.

**Первое приближение** в решении уравнения (16.5) получим, подставив в его правую часть нулевое приближение,  $a_{k(n)} = \delta_{kn}$ . Тогда это уравнение легко решается:

$$a_{m(n)}(t) = \delta_{mn} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt'. \quad (16.8)$$

Это — закон эволюции состояний «старого» базиса  $\{|k\rangle_i\}$  под действием нашего возмущения. В соответствии с (16.6) это означает, что состояние  $|n\rangle_i$  с течением времени переходит в состояние

$$|n_V^t\rangle = |n(t)\rangle_i - \frac{i}{\hbar} \sum_m \int_0^t V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}(t'-t)} dt' |m(t)\rangle_i. \quad (16.9)$$

(Здесь  $|n(t)\rangle_i$  — волновой вектор начального состояния  $|n\rangle_i$ , каким он стал бы к моменту времени  $t$  в отсутствие возмущения; вектор состояния  $|n_V^t\rangle$  — то, во что превратился вектор  $|n\rangle_i$  к моменту времени  $t$  под действием возмущения  $\hat{V}(t)$ .) Множитель  $e^{-i\omega_{mn}t}$  возник при переходе от базиса  $|m\rangle_i$  к базису  $|m(t)\rangle_i$ .

Амплитуда перехода из состояния  $|n\rangle_i$  начального гамильтониана в состояние  $|m\rangle_f$  вычисляется с помощью соотношения (16.7а). Соотношение (16.9) описывает разложение вектора состояния  $|n_V^t\rangle$ , который

получился из исходного под действием нашего возмущения, по векторам состояния исходного базиса  $\{|k(t)\rangle_i\}$ . Чтобы вычислить амплитуды перехода, удобно разложить базисные векторы конечного состояния  $|r(t)\rangle_f$  по векторам начального базиса  $\{|k(t)\rangle_i\}$ . В первом приближении обычной теории возмущений (5.8), отвечающем выписанному приближению для  $|n_V^t\rangle$ , искомое разложение имеет вид

$$|n(t)\rangle_f = |n\rangle_i e^{-iE_n t/\hbar} - \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}(\infty)}{\hbar\omega_{kn}} |k\rangle_i e^{-iE_k t/\hbar}. \quad (16.10)$$

Покажем, как эти результаты применяются в различных задачах.

• **А. Возмущение действует какое-то время, а затем выключается,  $\hat{V}(t) \rightarrow 0$  при  $t \rightarrow \infty$**  — вариант 1 § 16.2. В конце мы опять имеем дело с невозмущённой системой, набор новых волновых векторов  $\{|n\rangle_f\}$  совпадает с исходным  $\{|n\rangle_i\}$ , амплитуды перехода совпадают с коэффициентами  $a_{m(n)}$  (16.8).

Вероятность перехода из начального состояния  $|n\rangle_i$  в конечное состояние  $|m\rangle_f \equiv |m\rangle_i$  равна (при  $m \neq n$ )

$$A_{mn} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} dt \Rightarrow w_{mn} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} dt \right|^2. \quad (16.11)$$

• **Б. Возмущение, раз возникнув, затем действует неограниченно долго,  $\hat{V}(t) \rightarrow \hat{V}(\infty)$  при  $t \rightarrow \infty$**  — вариант 2 § 16.2. При этом новый набор собственных функций отличается от старого,  $\{|n\rangle_f\} \neq \{|n\rangle_i\}$ , см. (16.10). Проинтегрируем выражение  $a_{m(n)}$  (16.8) 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 (16.7) найденные выражения для проэволюционировавшего вектора начального состояния  $|n_V^t(t)\rangle$  (16.9) и для базисного вектора конечного состояния

(16.10), найдём при  $t \rightarrow \infty$  амплитуду перехода и его вероятность:

$$A_{mn} = \frac{1}{\hbar\omega_{mn}} \int_0^{\infty} \frac{dV_{mn}}{dt} e^{i\omega_{mn}t} dt \Rightarrow w_{mn} = |A_{mn}|^2. \quad (16.12)$$

▽ При медленном (*адиабатическом*) включении возмущения  $\hat{V}$  (с характерным временем изменения  $T$ ) экспонента под интегралом множится на малую величину  $\langle d\hat{V}/dt \rangle \sim \langle \hat{V} \rangle/T$ , что даёт для интеграла величину порядка  $1/\omega_{fi}T$ . Иными словами, состояние системы не изменяется с точностью до поправок  $\mathcal{O}(1/(\omega_{fi}T)^2)$ .

**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 (16.5) первого приближения (16.8), что выглядит как последовательность переходов через промежуточные состояния  $|n\rangle \rightarrow |r\rangle \rightarrow |m\rangle$ :

$$a_{m(n)}(t) = \delta_{mn} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt' - \\ - \frac{1}{\hbar^2} \sum_{r \neq m, n} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 V_{mr}(t_1) e^{i\omega_{mr}t_1} V_{rn}(t_2) e^{i\omega_{rn}t_2}. \quad (16.13)$$

Последующая процедура та же, что развита при обсуждении первого приближения.

### Соотношение со стационарной теорией возмущений § 5.3.

Чтобы описать действие постоянного во времени возмущения  $\hat{V}$ , введём вспомогательный объект — возмущение  $\hat{V}(t) = \hat{V}e^{t/\tau}$  ( $\tau \rightarrow \infty$ ), совпадающее с  $\hat{V}$  в настоящее время и исчезающее «в далеком прошлом» ( $t \rightarrow -\infty$ ). Экспоненциальный множитель обеспечивает сходимость интегралов (от  $t = -\infty$  до  $t = 0$ ), и получившиеся результаты очень просто преобразуются в коэффициенты разложения волновой функции по невозмущённому базису § 5.3. В сущности, именно это соответствие использовалось при выводе (16.12).

### 16.3.1. Пример. Возбуждение атома водорода пролетающим ионом

Пусть мимо атома водорода, находящегося в основном состоянии, пролетает тяжёлый ион с зарядом  $Z$  и массой  $M$  на достаточно большом расстоянии (прицельный параметр)<sup>1</sup>  $\rho \gg a_B$ . Требуется найти вероятность перехода атома  $W(\rho)$  в возбуждённое состояние, для определённости с  $n = 2$ .

Рассматриваются переходы под действием пучка ионов, прицельный параметр каждого из которых обычно не измеряется. Пока скорость иона не чрезмерно мала, неопределённость в значениях прицельного параметра  $\Delta\rho \sim \hbar/(M\Delta v)$  значительно меньше характерного атомного размера  $a_B$ . Поэтому можно считать, что вклады, доставляемые в вероятность перехода различными значениями  $\rho$ , не интерферируют, ответ получается суммированием вероятностей перехода по всем значениям прицельного параметра, оно описывается сечением процесса

$$\sigma = \int W(\rho) 2\pi\rho d\rho \quad (16.14)$$

(см. обсуждение понятия сечения в курсе «Механика» и в гл. 18).

В нашей задаче невозмущённый гамильтониан  $\hat{H}_0 = \hat{H}_H + \hat{K}$ , где  $\hat{H}_H$  — обычный гамильтониан атома водорода, а  $\hat{K} = \hat{p}_i^2/(2M)$  — оператор кинетической энергии иона. Пусть  $\mathbf{R}$ ,  $\mathbf{r}_e$  и  $\mathbf{r}_p$  — векторы положений иона, электрона и протона соответственно, а  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p = (x, y, z)$  — вектор положения 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 складывается из взаимодействия иона с ядром и с электроном,  $\hat{V}(t) = \frac{Ze^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_p|} - \frac{Ze^2}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_e|}$ . Поскольку  $\rho \gg a_B$ , а характерные значения расстояния между электроном и протоном  $\sim a_B$ , то  $r_e/R \ll 1$  и  $r_p/R \ll 1$ . Разложив  $\hat{V}(t)$  по этим малым параметрам, мы обнаруживаем, что возмущение сводится к воздействию иона на атом

<sup>1</sup>Можно считать, что вдали от атома ион движется по прямой, прицельным параметром называют минимальное расстояние от этой прямой до атома.

в целом, а не на протон и электрон по отдельности:

$$\hat{V}(t) = -\frac{Ze^2(\mathbf{Rr})}{R^3} \equiv -\frac{Ze^2(xvt + y\rho)}{(\rho^2 + v^2t^2)^{3/2}} \quad (\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p). \quad (16.15)$$

Этот оператор линеен по координатам *вектора*  $\mathbf{r}$ . Поэтому для него работают правила отбора разд. 12.2.1, переходы из основного  $s$ -состояния  $|i\rangle = |1, 0, 0\rangle$  возможны только в состояние  $|f\rangle$  с  $\ell = 1$ . (Тот же вывод получается, если подставить в матричные элементы  $\langle 1, 0, 0 | \hat{V}(t) | n, \ell, m \rangle$  явные выражения для оператора возмущения (16.15) и для угловой части волновых функций в сферических координатах.)

Рассмотрим состояния  $|f\rangle$  с  $n = 2$ , т.е.  $|f\rangle = |2, 1, \pm 1\rangle$  и  $\hbar\omega_{fi} = 1 - (1/4) = (3/4)$  (всё — в Ry). Используя волновые функции (9.20), (9.22), нетрудно вычислить теперь  $x_{fi} = \pm iy_{fi} = -(2^7/3^5)a_B$  и после простых переобозначений с учётом (9.14) получить матричные элементы переходов в состояния  $|f\rangle = |2, 1, \pm 1\rangle$  в виде

$$a_{f\pm i}(\infty) = \frac{2Ze^2x_{fi}}{\hbar v\rho} I_{\pm}(\beta), \quad \text{где } I_{\pm}(\beta) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i\beta u}(1 \pm iu)}{2(1+u^2)^{3/2}} du, \quad (16.16)$$

$$u = \frac{vt}{\rho}, \quad \beta = \frac{\omega_{fi}\rho}{v} = \frac{3}{8} \frac{\rho}{a_B} \frac{c\alpha}{v}.$$

Определяющий параметр нашей задачи  $\beta$  — произведение двух величин. Величина  $c\alpha/v$  представляет собой отношение характерной скорости движения электрона в атоме  $c\alpha$  к скорости иона  $v$ , она может меняться в широких пределах — от  $M/m_e \sim 10^4$  до  $\alpha \sim 0,01$ . Наш анализ позволяет определить сечение (16.14), если область  $\rho/a_B \gg 1$  даёт сюда основной вклад.

Подынтегральная функции (16.16) функция аналитична во всех точках верхней полуплоскости комплексной плоскости переменной  $u$ , кроме корневой точки ветвления при  $u = i$ . Связной областью аналитичности эта полуплоскость становится после удаления разреза, начинающегося в точке ветвления. Удобно направить этот разрез вверх вдоль мнимой оси. Теперь продолжим путь интегрирования в интеграле (16.16), идущий по действительной оси от  $-\infty$  до  $+\infty$ , дугой верхнего большого полукруга, за вычетом разреза, т.е. дойдём по этой дуге вверх до точки  $\varepsilon + i\infty$ , затем продолжим путь вниз справа от мнимой оси, обогнём снизу точку ветвления  $u = i$  и поднимемся с другой

стороны мнимой оси вверх до точки  $-\varepsilon + i\infty$ , затем контур замкнём дугой большого круга в точку  $-\infty$ . Внутри этого контура подынтегральное выражение не содержит особенностей, поэтому полный интеграл по этому контуру обращается в нуль. Вклады интегралов по дугам большого круга обращаются в нуль за счёт фактора  $e^{i\beta u}$  под интегралом. В итоге интересующий нас интеграл равен интегралу по разрезу ( $\varepsilon + i\infty \rightarrow i(1 - \varepsilon) \rightarrow -\varepsilon + i\infty$ ). При стремлении  $\varepsilon$  к нулю вклад этой полосы сводится к разности интегралов на двух берегах разреза. Для наглядности сделаем замену  $u = i(1 + w)$  и получим, например,

$$I_+(\beta) = e^{-\beta} \int_0^{\infty} e^{-\beta w} \frac{dw}{\sqrt{w(2+w)^3}}.$$

∇ Этот интеграл монотонно убывает с ростом  $\beta$ .

∇ При  $\beta \ll 1$  сходимость интеграла обеспечивается корнем в знаменателе, экспоненту можно отбросить. Легко проверить, что оставшийся интеграл есть 1.

∇ При  $\beta \gg 1$  интеграл сходится в области  $w \lesssim 1/\beta$ , где подкоренное выражение можно заменить просто на  $8w$ . 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 ( $v \lesssim \alpha c$ ) величина  $\beta \gg 1$  при всех допустимых нашим приближением (16.15) значениях прицельного параметра ( $\rho > a_B$ ). Получающаяся 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, т.е. не умеем определять полное сечение (16.14). Полученный результат можно использовать лишь в случаях, когда прицельный параметр удаётся измерить.

◇ Для быстрого иона ( $v \gg \alpha c$ ) 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 (16.14) 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 вклад в сечение происходит из области  $a_B < \rho < (8/3)(v/c\alpha)a_B$  (за счёт её большой ширины), что даёт 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.

## § 16.4. Скачкообразное изменение гамильтониана

Пусть переход гамильтониана к новому значению  $\hat{H}_f$  происходит очень быстро, т.е. за время  $\Delta t$ , 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;  $\beta$ -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  $w_{fn,ik} = |\langle n; f|k; i\rangle|^2$ . В этом интеграле обе волновые функции взяты в момент изменения потенциала ( $t = 0$ ). В частности, соотношение (16.12) даёт в этом случае

$$w_{fi} = |V_{fi}/(\hbar\omega_{fi})|^2. \quad (16.17)$$

*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 смещённым 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 (4.25) (второй вариант конечных состояний)<sup>1</sup>. Вычислим вероятность того, что система останется в основном состоянии  $w_{00}$ , используя волновую функцию (4.24):

$$\begin{aligned} w_{00} &= \left| \int dx C^2 e^{-x^2/2x_0^2} e^{-(x-a)^2/2x_0^2} \right|^2 = \left| \int dx C^2 e^{-(x^2 - xa + a^2/2)/x_0^2} \right|^2 = \\ &= \left| \int dx C^2 e^{-(x-a/2)^2/x_0^2 - a^2/4x_0^2} \right|^2 = e^{-F^2/(2\hbar m\omega^3)}. \end{aligned}$$

Подобным 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 (4.45):

$$w_{n0} = \frac{u^n}{n!} e^{-u}, \quad u = \frac{F^2}{2\hbar m\omega^3}. \quad (16.18)$$

Видно, что при небольших значениях  $F$  вероятность возбуждения разных состояний быстро падает с ростом  $n$ , обычная теория возмущений работает только при очень малых  $F$ .

• **Быстрый сдвиг стенки бесконечно глубокой ямы.**

Рассмотрим бесконечно глубокую прямоугольную яму со стенками  $[0, b]$  (1.20). Пусть правая стенка ямы мгновенно сдвигается  $[0, b] \rightarrow [0, b\alpha]$  (случай  $\alpha > 1$  отвечает расширению ямы, случай  $\alpha < 1$  — её сжатию.)

Состояния начальной ямы мы будем снабжать значком  $i$ , состояния конечной ямы — значком  $f$ . Амплитуда перехода из начального состояния  $|n\rangle_i$  (1.21) в конечное состояние  $|k\rangle_f$  (волновая функция которого получается из (1.21) заменой  $b \rightarrow b\alpha$ ) даётся простой свёрткой  $|M_{nk}^{if}| = {}_i\langle n|k\rangle_f$ . Для сжимающейся ямы ( $\alpha < 1$ ) вероятность перехода

<sup>1</sup>Это означает, что наше состояние — когерентное состояние нового гамильтониана (4.39) с  $\alpha = a/(x_0\sqrt{2})$ . Для амплитуд перехода и вероятностей можно воспользоваться результатами раздела 4.5, что немедленно даёт (16.18).

$$W_{nk}^{if} \equiv \left| M_{nk}^{if} \right|^2, \quad \text{где } |M_{nk}^{if}| = \frac{2k\sqrt{\alpha}}{\pi} \cdot \left| \frac{\sin(\pi n\alpha)}{k^2 - (n\alpha)^2} \right|. \quad (16.19)$$

• **Изменение состояния атома при  $\beta$ -распаде.** Изотоп водорода тритий  ${}^3\text{H}$  (с ядром, вдвое более тяжёлым, чем протон) распадается с периодом полураспада 12,26 года по схеме  ${}^3\text{H} \rightarrow {}^3\text{He}^+ + e + \bar{\nu}$  и с выделением энергии  $\varepsilon = 18,6$  кэВ на распад. Отдельный акт распада происходит за характерное время слабого взаимодействия  $\sim 10^{-26}$  с, т. е. мгновенно с точки зрения атомных времен (порядка  $10^{-15}$  с). На классическом языке отношение времени вылета родившегося электрона к периоду движения атомного электрона составляет  $\sim \sqrt{Ry/\varepsilon} \sim 1/30$ . За это время атомный электрон «не успевает» сдвинуться сколько-нибудь заметным образом. Поэтому можно считать атомный процесс мгновенным превращением атома водорода с тяжёлым ядром  ${}^3\text{H}$ , имеющим заряд  $e$ , в водородоподобный атом  ${}^3\text{He}^+$  с одним электроном, оставшимся от исходного атома и зарядом ядра  $2e$ . Термы таких атомов описываются в точности так же, как термы атома водорода (§ 9.3).

Пусть распадающийся атом трития находился в основном состоянии  $|1, 0, 0\rangle_H$ . Пренебрегая эффектами отдачи, найдём вероятность того, что получившийся водородоподобный атом  ${}^3\text{He}^+$  перейдёт в состояние  $|f\rangle \equiv |n, \ell, m\rangle_{He}$ . Как обсуждалось выше, амплитуда перехода в это состояние есть  $A_{fi} = {}_H\langle 1, 0, 0 | n, \ell, m \rangle_{He}$ . В силу сохранения момента импульса эта амплитуда отлична от нуля только при  $\ell = 0, m = 0$ . Дальнейшие выкладки с использованием водородоподобных волновых функций просты. В частности, простое использование (9.20) даёт  $A_{00} = (2\sqrt{2}/3)^3 \approx 0,84$ , и вероятность остаться в основном состоянии  $w_{00} = |A_{00}|^2 \approx 0,7$ .

Учёт отдачи сходен с тем, что делалось в начале § 7.10 для эффекта Мёссбауэра с тем различием, что в нашем случае распределение энергии между оставшимся ядром и лептонами (электрон и антинейтрино) не фиксировано, а зависит от угла между импульсами вылетевших электрона и антинейтрино.

## § 16.5. Периодическое возмущение

Вычислим вероятности переходов в результате действия периодического возмущения, включившегося в момент времени  $\tau = 0$  и выключ-

чившегося в момент времени  $\tau = t$

$$\hat{V}(\tau) = \hat{F}e^{-i\omega\tau} + \hat{G}e^{i\omega\tau} \equiv \hat{F}e^{-i\omega\tau} + \hat{F}^+e^{i\omega\tau}. \quad (16.20)$$

(Равенство  $\hat{G} = \hat{F}^+$  — следствие эрмитовости оператора  $\hat{V}(\tau)$ ).

### 16.5.1. Нерезонансное возмущение

Если нерезонансное возмущение мало, можно использовать теорию возмущений. Подставив (16.20) в (16.8), найдём

$$a_{m(n)}(t) = \delta_{mn} - \frac{F_{mn} (e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} - 1)}{\hbar(\omega_{mn} - \omega)} - \frac{F_{nm}^* (e^{i(\omega_{mn}+\omega)t} - 1)}{\hbar(\omega_{mn} + \omega)}. \quad (16.21)$$

Это решение справедливо только при  $|F_{mn}| \ll \hbar|\omega_{mn} \pm \omega|$ .

### 16.5.2. Почти резонансное возмущение

Теория возмущений неприменима, если для какой-то пары уровней  $m$  и  $n$  «расстройка»

$$\varepsilon = \omega_{mn} - \omega \equiv (E_m - E_n)/\hbar - \omega$$

близка к нулю, т.е. если возмущение почти резонансное. В этом случае следует решать уравнение (16.5) 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.

Рассмотрим случай, когда «резонирует» только одна пара уровней, т.е. нет других пар уровней  $m, n$  таких, что «расстройка»  $\omega_{mn} - \omega$  очень мала, и будем вычислять величины, усреднённые по таким временам  $t$ , что  $|\omega_{mn} + \omega|T \gg 1$ , а  $|\varepsilon|T \ll 1$ . При этом усреднении все средние  $\langle e^{i\alpha t} \rangle$  обращаются в нуль, если  $|\alpha| \gg |\varepsilon|$ . В результате в уравнениях (16.5) остаётся только пара резонирующих уровней и наша система уподобляется паре связанных классических осцилляторов под воздействием почти резонансной силы. В частности, в этом уравнении исчезают слагаемые, содержащие  $\exp(\pm i(\omega_{mn} + \omega)t)$ . В итоге эволюция пары рассматриваемых состояний описывается системой уравнений:

$$i\hbar \frac{da_{m(n)}}{dt} = F_{mn} e^{i\varepsilon t} a_{n(n)}, \quad i\hbar \frac{da_{n(n)}}{dt} = F_{mn}^* e^{-i\varepsilon t} a_{m(n)}. \quad (16.22)$$

Подставим  $a_{n(n)}$  из первого уравнения во второе и найдём

$$\frac{d^2 a_{m(n)}}{dt^2} - i\varepsilon \frac{da_{m(n)}}{dt} + \frac{|F_{mn}|^2}{\hbar^2} a_{m(n)} = 0.$$

Обозначив  $\eta = F_{mn}/\hbar$  и  $\Omega = \sqrt{\varepsilon^2/4 + |\eta|^2}$ , с использованием начального условия  $a_{k(n)} = \delta_{kn}$  получим решение этого уравнения:

$$a_{m(n)} = -\frac{i\eta}{\Omega} e^{i\varepsilon t/2} \sin \Omega t, \quad a_{n(n)} = \left( \cos \Omega t + \frac{i\varepsilon}{2\Omega} \sin \Omega t \right) e^{-i\varepsilon t/2}. \quad (16.23a)$$

Полезно выписать также

$$|a_{m(n)}|^2 = \frac{|\eta|^2}{\Omega^2} \sin^2 \Omega t, \quad |a_{n(n)}|^2 = 1 - \frac{|\eta|^2}{\Omega^2} \sin^2 \Omega t. \quad (16.23b)$$

Таким образом, система периодически, с частотой  $\Omega$ , переходит из состояния  $|n\rangle_i$  в  $|m\rangle_i$  и обратно. Эти биения с приближением к резонансу (с уменьшением  $\varepsilon$ ) становятся всё 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  $|F_{mn}| \ll \hbar\omega_{mn}$ .

• Учёт в уравнениях (16.22) для  $a_{n(n)}$  и  $a_{m(n)}$  отброшенных высокочастотных слагаемых, содержащих частоты  $\omega + \omega_{mn}$  (т.е. отказ от усреднения по времени), лишь несущественно изменит картину биений. Рассмотрение таких слагаемых обычно не имеет смысла без учёта переходов в другие состояния.

Возможность переходов в другие состояния приводит к уменьшению вероятности того, что система находится в резонирующих состояниях, это выглядит как затухание. Число этих нерезонансных состояний велико, и через очень большое время система может совсем «уплыть» из резонирующих состояний. Наше рассмотрение справедливо для умеренно больших интервалов времени. Серия вопросов для самостоятельного исследования, связанного с этой проблематикой (ответы на большинство из них автору не известны) собрана в задаче 16.7.

## § 16.6. Переходы в непрерывный спектр

Рассмотрим теперь задачу о переходе в непрерывный спектр под действием периодической внешней силы. Важным примером здесь яв-

ляется фотоэффект — вылет электронов из атома (или другой системы) под действием света (периодического электромагнитного поля). У этих задач есть две особенности.

**I.** Состояния непрерывного спектра не локализируются в конечной области пространства, они соответствуют почти свободно движущимся частицам, которые уходят далеко от нашей системы и не могут в неё вернуться (электрон просто улетает от ядра и не может быть захвачен им). Поэтому обратные переходы здесь не происходят, и биения не возникают.

**II.** Конечных состояний, энергия которых близка к какому-то определённом значению, много (например, при фотоэффекте электрон может вылететь в произвольном направлении). Физический интерес представляет вероятность перехода не в одно состояние  $|f\rangle$ , но в целую группу близких состояний, мы нумеруем их значком  $\nu$ . В выражении для вероятности 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 (16.7а) и плотность числа состояний  $\rho(\nu)$  соотношением

$$dw_{fi} = |A_{fi}(\nu)|^2 \rho(\nu) d\nu. \quad (16.24)$$

Будем считать, что в начальном состоянии находится много одинаковых атомных систем. Физический интерес представляет скорость переходов (число переходов в единицу времени)  $r_{fi}$ , усреднённая по времени  $t$ , большому по сравнению со временем характерных процессов в системе и во внешнем поле  $1/\omega$  и в то же время достаточно малому, чтобы пренебречь уменьшением числа частиц в исходном состоянии<sup>1</sup>:

$$r_{fi} = \frac{d}{dt} \int \langle dw_{fi} \rangle_{\omega t \rightarrow \infty} \equiv \frac{d}{dt} \int \langle |A_{fi}(\nu)|^2 \rho(\nu_f) d\nu_f \rangle_{\omega t \rightarrow \infty}. \quad (16.25)$$

Вероятность перехода в состояние  $f$  за большое время есть, очевидно,

$$W_{fi}(t) = e^{-r_{fi}t}. \quad (16.26)$$

<sup>1</sup>Такое определение отвечает обсуждаемому на стр. 364 описанию, см. также обсуждение объекта, описываемого квадратом  $\delta$ -функции (В.4).

### 16.6.1. Плотность числа состояний

Мы нумеруем состояния значком  $\nu$  (это может быть энергия, квазиимпульс или ещё что-нибудь). Обычно число различных состояний системы  $dN$ , принадлежащих интервалу от  $\nu$  до  $\nu + d\nu$ , пропорционально объёму системы  $V$ , т. е.  $dN = \rho(\nu)d\nu V$ . Функцию  $\rho(\nu)$  называют *плотностью числа состояний* по  $\nu$  (в единице объёма). Если энергии частиц велики по сравнению с энергией взаимодействия  $U$ , то большую часть времени частица проводит в области, где её движение почти свободное. Далее всю систему заключают в большой кубический ящик со стороной  $L$  (объём  $V = L^3$ ) с непрозрачными стенками. Получив решение, переходят к пределу  $L \rightarrow \infty$  там, где это возможно.

• Найдём для примера число состояний  $\Delta N$  с величиной импульса  $p = |\mathbf{p}|$  в интервале  $(p, p + \Delta p)$ . Базисные монохроматические состояния — стоячие волны  $\psi = A \sin(\pi n_x x/L) \sin(\pi n_y y/L) \sin(\pi n_z z/L)$ . В интервале  $(p, p + \Delta p)$  мы имеем набор таких плоских, 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). Для распределения по величине импульса  $p$  надо учесть только положительные  $n_i$ . Поэтому  $\Delta^3 p \Rightarrow 4\pi p^2 \Delta p / 8$ , и  $\Delta N = V \pi p^2 \Delta p / (\pi \hbar)^3 \Rightarrow \rho(p) = \pi p^2 / (\pi \hbar)^3$ .

То же число состояний можно получить, считая ящик продолженным на всё пространство и наложив условие периодичности на границах ящика. 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 объёма приходится  $\Delta p \Delta q / (2\pi \hbar)$  квантовых состояний (6.11).

• Во многих физических задачах ключевую роль играет плотность распределения состояний по энергиям ( $\nu = E$ ). При этом

$$dN = V \rho(p) dp = V \rho(E) dE \Rightarrow \rho(E) = \rho(p(E)) \frac{dp}{dE}. \quad (16.27a)$$

В случае свободного движения электронов ( $e$ ) мы имеем  $E = p^2 / (2m)$ ,

т. е.  $dE/dp = p/m$ , а для фотонов ( $\gamma$ )  $E = pc$ , т. е.  $dE/dp = c$ . Поэтому (для фотонов мы записываем распределение по частотам  $\omega = E/\hbar$ )

$$\rho_e(E) = \frac{4\pi\sqrt{E}(2m)^{3/2}}{(2\pi\hbar)^3}, \quad \rho_\gamma(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2c^3}. \quad (16.27b)$$

В реальности распределение по импульсам (или квазиимпульсам) качественно сходно с тем, что обсуждалось выше для свободных частиц. Нетривиальные эффекты вносятся видом закона дисперсии  $E(p)$  (ср. например (7.14)). Упомянем о случае, когда зависимость  $E(p)$  имеет максимум, минимум или точку перегиба при некотором значении  $E = E_0$ , отвечающем импульсу  $p = p_0$ , т. е.  $dE/dp|_{p=p_0} = 0$  (Cohen). В этом случае плотность числа состояний в точке  $E = E_0$  обращается в бесконечность (сингулярна). Это может вызвать к жизни новые неожиданные эффекты.

### 16.6.2. Переходы в слабом периодическом поле

Рассмотрим переход в непрерывный спектр под действием слабого периодического возмущения (16.11). Теория возмущений (16.21) работает в этом случае вне зависимости от частоты внешней силы. Перепишем ответ (16.21) в другой форме для случая, когда энергия конечного состояния выше энергии начального состояния, т. е.  $\omega_{fi} > 0$ :

$$a_{fi} = A_\varepsilon + A_\Delta, \quad \text{где} \quad \begin{cases} A_\varepsilon = -F_{fi} \frac{e^{i\varepsilon t/2} 2i \sin(\varepsilon t/2)}{\hbar\varepsilon} & (\varepsilon = \omega_{fi} - \omega), \\ A_\Delta = -F_{fi}^* \frac{e^{i\Delta t/2} 2i \sin(\Delta t/2)}{\hbar\Delta} & (\Delta = \omega_{fi} + \omega). \end{cases}$$

По общим формулам, вероятность перехода

$$w_{fi} = \int [ |A_\varepsilon|^2 + 2\text{Re}(A_\varepsilon A_\Delta^*) + |A_\Delta|^2 ] \rho(E_f) dE_f,$$

где, в частности,  $|A_\varepsilon|^2 = |F_{fi}|^2 \sin^2(\varepsilon t/2)/(\hbar\varepsilon)^2$ . 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 всё более узкой области  $|\varepsilon| = |E_f - E_i - \hbar\omega|/\hbar \lesssim 1/t$ . Скорость перехода (16.25) получается из этой вероятности делением на  $t$  и переходом  $t \rightarrow \infty$ . После этого

остаётся лишь квадрат первого слагаемого и интеграл по области, содержащей состояние  $f$ , для которого  $\omega_{fi} = \omega$ :

$$r_{fi} = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{\Delta E_f} \rho(E_f) dE_f \left| \frac{F_{fi}}{\hbar} \right|^2 \frac{4 \sin^2(\varepsilon t/2)}{\varepsilon^2 t}. \quad (16.28)$$

В приложении § В.1 показано, что  $\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t} = \delta(\alpha)$ . Подставляя этот предел в (16.28), находим скорость перехода (*золотое правило Ферми*)

$$\begin{aligned} r_{fi} &= \int_{\Delta E} \rho(E_f) dE_f |F_{fi}/\hbar|^2 2\pi \delta(\omega_{fi} - \omega) = \\ &= |F_{fi}/\hbar|^2 \cdot 2\pi \hbar \rho(E_f)|_{E_f=E_i+\hbar\omega}. \end{aligned} \quad (16.29)$$

Итак, при  $t \rightarrow \infty$  выполняется закон сохранения энергии: *энергия системы меняется в точности на величину энергии одного кванта внешнего поля*<sup>1</sup>. Промежуточные соотношения (В.3) при получении этого представления  $\delta$ -функции показывают, что при конечных временах существенными становятся другие значения энергии  $E_f \neq E_i + \hbar\omega$ . Их характерный разброс увеличивается с уменьшением  $t$  — в соответствии с соотношением неопределённостей  $\Delta E \Delta t \geq \hbar/2$ .

• Почти ту же задача решается в другой постановке. *Найти вероятность перехода в системе, на которую падает поток фотонов с энергией  $\hbar\omega$ .*

Решение выглядит следующим образом. Ясно, что переходы возможны только с сохранением энергии  $\omega_{fi} = \omega$ . Поэтому амплитуда перехода  $M_{fi} \propto F_{fi} \delta(\omega_{fi} - \omega)$ . Получающаяся вероятность перехода  $|M_{fi}|^2$  содержит объект, который не определён как обобщённая функция, это — квадрат  $\delta$ -функции  $\delta^2(\omega_{fi} - \omega)$ . Появление этого объекта связано с тем, что мы использовали идеализацию плоских волн вместо отвечающего существу задачи подхода, основанного на волновых пакетах, ср. обсуждение на стр. 25.

Вычисления в приложении § В.1 показывают, что квадрат  $\delta$ -функции следует понимать как  $\delta^2(\omega_{fi} - \omega) \Rightarrow \delta(\omega_{fi} - \omega) \times t/\pi$ , где  $t$  —

<sup>1</sup>Эта интерпретация становится точной, только если иметь в виду, что к гамильтониану (16.2) добавлен вторично квантованный гамильтониан поля  $\hat{H}_{field}$ . Вторичное квантование  $\hat{H}_{field}$  — необходимое условие появления понятия фотонов с энергией  $\hbar\omega$ . Без этого золотое правило Ферми — просто свойство конкретного класса задач.

время действия нашего периодического возмущения (потока фотонов) — «длина волнового пакета».

Подобным образом в некоторых вычислениях может появиться квадрат дельта-функции от импульсов  $\delta^2(\mathbf{p}_{fi} - \mathbf{p})$ . Как и в изложенном примере, этому выражению придаётся смысл соотношением  $\delta^2(\mathbf{p}_{fi} - \mathbf{p}) \Rightarrow \delta^2(\mathbf{p}_{fi} - \mathbf{p})(1/\pi\hbar)^3 V$ , где  $V$  — объём области, занимавшейся первоначальным пакетом.

### § 16.7. 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*. (В физике твёрдого тела различают *внешний фотоэффект с вылетом электрона из исследуемого образца* и *внутренний фотоэффект с вылетом ранее связанного электрона в зону проводимости*. При описании внутреннего фотоэффекта выражение для плотности числа состояний может заметно отличаться от (16.27).)

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 интенсивность их поглощения определяется в основном фотоэффектом.

В качестве важного **примера** рассмотрим *фотоэффект на атоме водорода, находящемся в основном состоянии* (9.20) с энергией  $E_i = -1 \text{ Ry}$ . Чтобы не усложнять вычисления, мы рассмотрим лишь случай умеренно больших частот поля

$$\hbar\omega \gg mc^2\alpha^2/2 \equiv 1 \text{ Ry}; \quad m_e c^2 \gg \hbar\omega. \quad (16.30a)$$

При этих условиях энергия вылетевшего электрона  $E_f \approx \hbar\omega - 1 \text{ Ry}$  мало отличается от энергии фотона в волне, а импульс фотона  $\hbar k = \hbar\omega/c$  мал по сравнению с импульсом вылетевшего электрона  $p$ :

$$E_f \equiv p^2/(2m) \approx \hbar\omega, \quad \hbar k = \frac{\hbar\omega}{c} \ll p = \frac{2E_f}{v} \Rightarrow \frac{\hbar k}{p} \approx \frac{v}{2c}. \quad (16.30b)$$

Условия (16.30a) означают также, что скорость вылетевшего электрона  $v = p/m$  значительно больше характерной скорости электрона в атоме

$c\alpha$  (малость скорости по сравнению со скоростью света  $c$  обеспечивает возможность нерелятивистского рассмотрения):

$$c\alpha \ll v = \frac{p}{m} \ll c, \text{ кроме того } \frac{pa_B}{\hbar} \gg 1. \quad (16.30c)$$

В этих условиях вылетевший электрон задерживается вблизи оставшегося иона на время, меньшее характерного атомного времени (9.14). Поэтому для него можно с хорошей точностью использовать волновую функцию свободного движения<sup>1</sup>

$$\psi_f = e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar}. \quad (16.31)$$

Для вычисления вероятности перехода мы используем результат (16.29). Входящий в ответ оператор возмущения  $\hat{F}$  (16.20) в соответствии с (11.7) имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{F} &= -\frac{e}{mc} \left( \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} + \mathbf{A}_0^* e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} \right) \hat{\mathbf{p}} \equiv \\ &\equiv i \frac{e}{m\omega} \left( \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} - \mathbf{E}_0^* e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} \right) \hat{\mathbf{p}}. \end{aligned}$$

(Мы воспользовались выражением вектора–потенциала через электрическое поле в кулоновской калибровке (14.12).) В соответствии с (14.17) оператору уничтожения фотона отвечает первое — положительно частотное — слагаемое этого выражения.

Матричный элемент оператора возмущения между начальным состоянием электрона в основном состоянии атома водорода (9.20) и его конечным состоянием (16.31) (с поглощением фотона) вычисляется следующим образом. Сначала выполняется интегрирование по частям и отбрасывается  $\hbar k$  по сравнению с  $p$  — в силу (16.30b). Затем выполняется интегрирование по направлениям вектора  $\mathbf{r}$  относительно направления  $\mathbf{p}$ , и в конце выполняется интегрирование по  $r$ :

$$\begin{aligned} F_{fi} &= -\frac{e\hbar}{m\omega} \mathbf{E}_0 \int e^{-i(\mathbf{p}\mathbf{r}/\hbar - \mathbf{k}\mathbf{r})} \nabla \frac{e^{-r/a_B}}{\sqrt{\pi a_B^3}} d^3 r = \\ &= i \frac{8e\sqrt{\pi a_B^3}}{m\omega} \frac{(\mathbf{p}\mathbf{E}_0)}{(1 + p^2 a_B^2/\hbar^2)^2} \approx i \frac{8e\hbar^4 (\mathbf{p}\mathbf{E}_0)}{m\omega p^4} \sqrt{\frac{\pi}{a_B^5}}. \end{aligned}$$

<sup>1</sup>Для возбуждённых состояний атома водорода и для молекулярных термов условие (16.30), обеспечивающее применимость приближения (16.31), ослабляется. Например, для атома водорода в состоянии  $|n, \ell, m\rangle$  условие ( $\hbar\omega > mc^2\alpha^2/2$ ) заменяется на ( $\hbar\omega > mc^2\alpha^2/(2n^2)$ ).

Введём единичный вектор, направленный вдоль импульса вылетевшего электрона  $\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$ , и частоту  $\omega_0 = Ry/\hbar$ . В этих обозначениях число вылетов электрона в элемент телесного угла  $d\Omega$  за единицу времени (16.29) имеет вид  $dr_{fi} = \frac{64a_B^3}{\pi\hbar} |\mathbf{n}\mathbf{E}_0|^2 \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{9/2} d\Omega$ . Деление этого выражения на полный поток падающих фотонов в волне  $cE_0^2/(2\pi\hbar\omega)$  (величину вектора Пойнтинга (14.8), делённую на энергию одного фотона  $\hbar\omega$ ) даёт дифференциальное сечение

$$d\sigma = 64\alpha a_B^2 \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{7/2} \cos^2\theta d\Omega, \quad (16.32)$$

где  $\theta$  — угол вылета электрона по отношению к направлению вектора поляризации падающей волны. Полное сечение фотоэффекта быстро падает с ростом частоты фотона,

$$\sigma = (256/3)\alpha\pi a_B^2 (\omega_0/\omega)^{7/2}. \quad (16.33)$$

В области параметров, описываемых нашим расчётом (16.30), 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 растёт как  $Z^5$ . Та же зависимость ( $\propto Z^5$ ) возникает и в тяжёлых нейтральных атомах для фотоэффекта с ближайшей к ядру оболочки ( $K$ -оболочки). Обратите внимание, что при  $Z \sim 80 \div 100$  область применимости используемого приближения (16.30) исчезает, поскольку слева 1 Ry заменяется на  $Z^2 Ry$ .

## § 16.8. Адиабатический случай

При изучении явлений с изменяющимся во времени гамильтонианом критическую роль играет соотношение между характерным временем изменения потенциала  $\tau_I = |U/\langle dU/dt \rangle|$  и характерным временем движения в изучаемом состоянии<sup>1</sup>  $T_{En} = |\hbar/E_n|$ .

<sup>1</sup>Более аккуратно следовало бы говорить о характерном времени перехода  $\hbar/|E_n - E_m|$ .

При медленном изменении потенциала, когда  $\tau_I \gg T_{En}$  удобно использовать **адиабатический подход**. В этом подходе время изменения потенциала разбивается на множество интервалов небольшой длительности  $T_{k+1} - T_k$ . Эволюция системы в этом интервале описывается стационарным уравнением Шредингера с постоянным потенциалом  $U(T_k)$  и начальным условием, которое получилось из решения уравнения Шредингера на предыдущем интервале (с потенциалом  $U(T_{k-1})$ ). Примеры такого рода можно найти в [9,13,14,16].

## § 16.9. Задачи

- В задаче о меняющей ширину бесконечно глубокой прямоугольной яме, стр. 356
  - получить амплитуду перехода  $|n\rangle_i \rightarrow |k\rangle_f$  для  $\alpha > 1$ ;
  - показать, что в случае когда  $n\alpha$  — целое число, вероятность  $W_{nk}^{if} = \alpha \cdot \delta_{k,n\alpha}$ ; объяснить этот результат.
- Частица находилась в связанном состоянии в поле притяжения  $\hat{U} = -G_0\delta(x)$ . 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. Проверить сохранение вероятности в расчёте.
- Вычислить вероятности переходов в случае мгновенной передачи частице в осцилляторе некоторого импульса (удар по осциллятору).
- Найти вероятности переходов заряженной частицы в другие состояния при  $t \rightarrow \infty$  под действием возмущения  $V(x, t) = -eExf(t)$  в первом порядке теории возмущений, для разных  $f(t)$  и  $t_0 = -\infty$ :
  - из  $n$ -го состояния глубокой прямоугольной ямы с шириной  $2a$ ;
  - из  $n$ -го состояния осциллятора с частотой  $\omega$ ;
  - из состояния со значением  $L_z = \hbar m$  для плоского ротатора;
    - $f(t) = e^{-(t/\tau)^2}$ ,
    - $f(t) = \frac{\tau^2}{\tau^2 + t^2}$ ,
    - $f(t) = (1 - e^{-t/\tau}) \theta(t)$ ,
    - $f(t) = e^{-|t|/\tau}$ ,
    - $f(t) = (e^{-t/\tau_1} + b \sin(\omega_1 t) e^{-t/\tau}) \theta(t)$ . Обсудить случаи  $\tau_1 = \tau$ ,  $\tau_1 \rightarrow \infty$ .

5. Частица находилась в связанном состоянии в поле притяжения  $\hat{U} = -G_0\delta(x)$ . В момент времени  $t = 0$  дополнительно включается слабое однородное поле  $\hat{V} = -xF \sin(\omega_0 t)$ . Найти вероятность того, что к моменту времени  $t$  частица останется связанной в поле ямы.

*Указание:* В вычислении для конечного состояния достаточно использовать антисимметричную функцию (2.38) (см. задачи 8.35 и 8.36 из [16]).

6. Получите угловое распределение фотоэффекта, заменяющее (16.32), для неполяризованного света.

7. **Задачи — дополнения к разделу 16.5.2.**

При изучении почти резонансного воздействия на систему в разд. 16.5.2, мы пренебрегаем всеми другими уровнями и уходом на них. Можно ожидать, что учёт этих уровней приводит к уходу системы из пары резонирующих уровней — это выглядит как затухание (трение) — за долгое время. Исследование этих и смежных вопросов составляет набор задач для самостоятельного исследования (решения которых в большинстве автору не известны).

1. Надо придумать усреднённое описание этого затухания как некоторого трения (с уменьшением вероятности).

- Как описать долговременный эффект этих уходов из нашей системы с помощью одного-двух параметров?
- Как связать эти параметры со свойствами системы уровней?
- Может быть, есть ситуации, когда такое простое дополнительное описание невозможно. Что это за ситуации?
- А может быть возможны осцилляции с периодическими возрастаниями амплитуды наших биений (маловероятно, но — если возможно — очень интересно). Что это за ситуации?

2. Пусть резонирует не пара уровней (например, 1 и 2), а несколько (1 и 2, 2 и 3, 3 и 4, ...) Что тогда происходит в разных случаях:

- три соседних уровня 1, 2 и 3 образуют (почти) эквидистантную систему так, что частоты 12 и 23 или в точности равны или близки (надо разумно определить, что такое близость);
- то же, когда резонируют несколько пар термов (лестница).
- то же, когда резонируют 12 и 34.

3. Разработать способ вычисления для периодического возмущения большой амплитуды, когда вычисленная частота биений (16.23) превышает частоту внешней силы  $\omega$ .

## Глава 17

# Испускание и поглощение излучения

Мы рассмотрим здесь те процессы, для описания которых достаточно нерелятивистской квантовой механики. Выход за рамки этих подходов — задача *КВАНТОВОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ*.

### § 17.1. Излучение и поглощение света

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 поля 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  $\hbar\mathbf{k}$  (причём  $k = \omega_{ud}/c$ ), и вектор поляризации  $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}$ .

Выполним сначала некоторые оценки на примере излучения в атоме водорода при изменении главного квантового числа  $n$  на единицу ( $n_u - n_d = 1$ ). Для такого атома характерный размер области взаимодействия определяется наименьшим характерным размером для состояния  $d$  — радиусом  $a_B n_d^2$ , соответствующая характерная скорость  $v = \alpha/n_d$ . Произведение

$$ka = \frac{E_u - E_d}{\hbar c} a = 1\text{Ry} \frac{1}{\hbar c} \left( \frac{1}{n_d^2} - \frac{1}{n_u^2} \right) a_B n_d^2 \sim \frac{e^2}{2\hbar c} \cdot \left( \frac{2}{n_d} \right) \sim \frac{\alpha}{n_d} \sim \frac{\langle v \rangle}{c}.$$

Здесь  $\alpha \approx 1/137$  — постоянная тонкой структуры, в вычислениях мы использовали выражения (9.14). Вообще оценка

$$ka \lesssim v/c \lesssim \alpha \ll 1 \quad (17.1)$$

справедлива для спонтанного излучения любой системы с нерелятивистским движением частиц.

### 17.1.1. Коэффициенты Эйнштейна

Эйнштейн предложил подразделять скорости радиационных переходов (числа переходов в секунду) по их «происхождению».

*Скорость вынужденных переходов  $d \rightarrow u$  есть*

$$r_{d \rightarrow u} N(d) = B_{du} U(\omega_{ud}) N(d). \quad (17.2a)$$

*Скорость переходов  $u \rightarrow d$  (вынужденных и спонтанных) есть*

$$r_{u \rightarrow d} N(u) = [A_{ud} + B_{ud} U(\omega_{ud})] N(u). \quad (17.2b)$$

Введённые 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 (14.22) и запишем отношение скоростей переходов в расчёте на один атом:

$$\frac{r_{d \rightarrow u}}{r_{u \rightarrow d}} = \frac{B_{du} n_{\mathbf{k}\lambda} \hbar \omega^3 / (\pi^2 c^3)}{A_{ud} + B_{ud} n_{\mathbf{k}\lambda} \hbar \omega^3 / (\pi^2 c^3)}. \quad (17.3)$$

В согласии с (4.11), (14.21), для состояния поля с  $n$  фотонами данного типа матричный элемент излучения, т. е. добавления ещё одного фотона, домножается на  $\langle n+1 | \hat{a}^+ | n \rangle = \sqrt{n+1}$ , а матричный элемент поглощения — на  $\langle n-1 | \hat{a} | n \rangle = \sqrt{n}$ . Поэтому вероятности излучения и поглощения связаны соотношением

$$\frac{w^{полл}}{w^{изл}} = \frac{r_{d \rightarrow u}}{r_{u \rightarrow d}} = \frac{n}{n+1}.$$

Сравнивая с (17.3), получим *соотношения Эйнштейна*:

$$B_{ud} = B_{du}, \quad A_{ud} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot B_{ud}. \quad (17.4)$$

Мы получили, в частности, что *коэффициенты вынужденного излучения и поглощения совпадают*. Это позволяет далее не выписывать индексы  $ud$  и  $du$  у коэффициентов Эйнштейна.

### 17.1.2. Вероятность излучения. Подход Ферми

Идея подхода Ферми состоит в том, что скорость **поглощения** света атомной системой несомненно описывается в подходе разд. 16.6.2, см. (16.29). Из выражения для этой скорости с помощью (17.4) отыскивается скорость спонтанного излучения. Такой подход позволяет обойтись без аккуратных формул квантования электромагнитного поля.

Итак, пусть на рассматриваемую атомную систему падает достаточно длинный пакет волн электромагнитного поля, в среднем поляризованных вдоль оси  $z$ , с напряжённостью электрического поля  $E$  и с частотой  $\omega$ . Мы рассмотрим переходы между уровнями  $u$  и  $d$  атомной системы в поле этого пакета. Считая нашу систему одноэлектронной, запишем возмущение в виде  $V(t) = eEz \cos \omega t$ . Это частный случай периодического возмущения (16.11) с  $F = eEz/2$ .

Волновой пакет не бывает монохроматическим, его разброс по частотам описывается спектральной плотностью  $\bar{\rho}(\omega)$ . Поэтому выражение для скорости переходов в непрерывный спектр (16.29) применимо с небольшими изменениями для описания  $u \leftrightarrow d$  переходов в поле этого пакета. В частности, вероятность перехода  $d \rightarrow u$  есть (ср. (16.29))

$$\frac{e^2 \mathcal{E}^2 |z_{ud}|^2}{4\hbar^2} \cdot \frac{4 \sin^2 \left( \frac{\omega_{ud} - \omega}{2} \right) t}{(\omega_{ud} - \omega)^2} dN \Rightarrow \pi t \frac{e^2 E^2 |z_{ud}|^2}{2\hbar^2} \delta(\omega_{ud} - \omega) \bar{\rho}(\omega) d\omega \frac{d\Omega}{4\pi}.$$

Подставляя сюда  $E^2 = 8\pi \cdot U$ , найдём

$$r_{d \rightarrow u} = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar^2} |z_{ud}|^2 \cdot U(\omega_{ud}) \frac{d\Omega}{4\pi}.$$

Зависимость матричного элемента  $z_{ud}$  от углов определяется множителем  $\cos \theta$ . Усреднение по углам для сферически симметричного распределения электрона в атоме даёт 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):

$$r_{d \rightarrow u}^{(1)} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} |\mathbf{r}_{ud}|^2 \cdot U(\omega_{ud}). \quad (17.5)$$

• Используя теперь (14.22) и (17.4), получим **вероятность спонтанного дипольного излучения** за единицу времени (скорость излучения) и интенсивность этого излучения  $I(\omega)$  — среднюю энергию, излучаемую за секунду:

$$r^{\text{спонт}} = \frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{r}_{ud}|^2 \equiv \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{ud}|^2, \quad (17.6)$$

$$I(\omega) = r^{\text{спонт}} \hbar\omega = \frac{4e^2\omega^4}{3c^3} |\mathbf{r}_{ud}|^2 \equiv \frac{4\omega^4}{3c^3} |\mathbf{d}_{ud}|^2,$$

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**.

### 17.1.3. Излучение света. Квантованные поля

Теперь мы опишем излучение света более строгим образом, без обращения к термодинамическим идеям. Это позволит получить полное описание, включая зависимости от углов и поляризаций, которые в подходе Ферми получать трудно. Этот метод легко позволяет рассмотреть и излучение высших мультиполей.

В терминах квантованного электромагнитного поля (разд. 14.2.3) для системы (*атом + электромагнитное поле*) процесс излучения — 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  $\epsilon_\lambda$ , которые не меняются в рассматриваемом процессе.

В рассматриваемых задачах размер  $a$  области движения в состоянии, определённом невозмущённым гамильтонианом, достаточно мал ( $ka \ll 1$ ), и в соответствии с (17.1) можно учитывать воздействие поля с излучающей системой как возмущение, линейное по полю (14.16):

$$\hat{V} = -\frac{e}{mc} \left( \frac{\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})}{2} \right) - g\mu_B(\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{B}}) \equiv -\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r})\hat{\mathbf{p}} - g\mu_B(\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{B}}). \quad (17.7)$$

Два выражения для этого оператора эквивалентны в силу (14.19). Мы употребляем обычно вторую из этих форм, но иногда удобнее исполь-

зывать первую. Амплитуда вероятности интересующего нас перехода принимает вид

$$V_{du} = \langle \psi_d, n_{\mathbf{k}\lambda} + 1, \dots | \hat{V} | \psi_u, n_{\mathbf{k}\lambda}, \dots \rangle. \quad (17.8)$$

**Главное (дипольное) приближение.** Поскольку  $ka \ll 1$ , в экспонентах  $e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  для оператора поля (14.16) можно ограничиться только первым членом разложения по  $kr$ , т.е. положить  $e^{\pm i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 1$ . В том же приближении отбрасывается и взаимодействие со спином. В итоге в нашем приближении

$$\hat{V} = \hat{V}^{(1)} = -\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{A}}(0) \hat{\mathbf{p}}. \quad (17.9)$$

Теперь интересующий нас матричный элемент сводится к произведению матричного элемента между фотонными состояниями и матричного элемента импульса по невозмущённому 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 учётом (14.17) это отвечает записи оператора взаимодействия в виде

$$\hat{V} = -\mathbf{d} \hat{\mathcal{E}}(0), \quad \hat{\mathbf{d}} = e\hat{\mathbf{r}}. \quad (17.10)$$

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 (17.8) выражения (14.17), (14.21), получим

$$V_{du} = -\frac{i\omega_{du}}{c} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega L^3}} \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{d}_{du}. \quad (17.11)$$

Используя (16.29) и (16.27b), найдём теперь вероятность излучения фотона в единицу времени в элемент телесного угла  $d\Omega$

$$\begin{aligned} dr_{\mathbf{k}\lambda} &= \frac{2\pi}{\hbar} |V_{du}|^2 \delta(\hbar\omega - E_u + E_d) \frac{L^3 d^3 \mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \frac{L^3 \omega^2}{(2\pi\hbar)^2 c^3} |V_{du}|^2 \Rightarrow \\ &\Rightarrow dr_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{\omega_{du}^3}{2\pi\hbar c^3} |\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{d}_{du}|^2 (n_{\mathbf{k}\lambda} + 1) d\Omega. \end{aligned} \quad (17.12)$$

Объём  $L^3$  из результата выпал, 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 (17.4), поглощение света описывается формулой такого же вида 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  $\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda$  задаются источником поля, излучённый свет *когерентно* складывается с падающим. В этом случае формула (17.12) определяет характер возбуждения дипольного момента и интенсивность излучённого света. Ниже  $\mathbf{n}$  — единичный вектор, направленный вдоль волнового вектора,  $\theta$  — полярный угол вылета фотона.

При описании спонтанного излучения формула (17.12) по известному типу возбуждения дипольного момента определяет угловое распределение, поляризацию и интенсивность излучения. Суммирование по поляризациям вылетевшего фотона с учётом (14.13) даёт угловое распределение вероятности вылета фотона

$$\frac{dr_{\mathbf{k}}}{d\Omega} = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |[\mathbf{d}_{ud} \times \mathbf{n}]|^2, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}}{k}. \quad (17.13)$$

Излучённый свет оказывается нетривиально поляризованным, если поляризовать излучающую среду, организовав дело так, чтобы только некоторые компоненты матричного элемента  $\mathbf{d}_{ud}$  отличались от нуля. При этом различным оказывается и усреднённое 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 излучения на энергию одного фотона  $\hbar\omega$  (результат тот же, что и в подходе Ферми (17.6)):

$$r^{\text{спонт}} = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{ud}|^2, \quad I = r^{\text{спонт}} \hbar\omega = \frac{4\omega^4}{3c^3} |\mathbf{d}_{ud}|^2. \quad (17.14)$$

◇ Результат (17.6), (17.14) 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 (17.6) входит матричный элемент дипольного момента, отвечающий переходам *в одну сторону*  $u \rightarrow d$ . В классическое выражение входит Фурье-компонента дипольного момента с частотой  $\omega_{ud}$ , отвечающая *колебаниям*  $u \leftrightarrow d$ . Эта Фурье-компонента состоит из двух слагаемых, отвечающих переходам  $d \rightarrow u$  и  $u \rightarrow d$ , т. е.

$$\mathbf{d}_\omega = \mathbf{d}_{ud}e^{i\omega_{ud}t} + \mathbf{d}_{du}e^{-i\omega_{ud}t},$$

причём  $\mathbf{d}_{du} = \mathbf{d}_{ud}^*$ . 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 (17.6) по форме совпадает с классическим — в полном согласии с принципом соответствия.

## § 17.2. Излучение высших мультиполей

В ряде важных случаев представляют интерес излучение при переходах, для которых правила отбора (17.20) 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 (17.20) не выполняются ни для каких уровней, лежащих ниже интересующего нас уровня  $u$ . Переходы с нарушением правил отбора (17.20) называются *запрещёнными*, поскольку их вероятности значительно меньше, чем для электрического дипольного излучения.

▼ **Следующий член разложения по  $ka$ .** Итак, пусть  $\mathbf{d}_{ud} = 0$ . В этом случае в амплитуде перехода (17.8) 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 (14.16)<sup>1</sup>. Тот же порядок по  $ka$  имеет и оператор спинового взаимодействия. В итоге взамен (17.10) оператор взаимодействия при-

<sup>1</sup>В приводимых формулах учитываются только слагаемые, отвечающие операторам рождения фотонов. Учёт слагаемых с операторами уничтожения, необходимый при изучении поглощения света, не внося ничего нового в результаты, сделал бы вычисления более громоздкими.

нимает вид:

$$\hat{V}^{(2)} = -\frac{ie}{mc}(\mathbf{k}\mathbf{r})(\hat{\mathbf{A}}(0)\hat{\mathbf{p}}) - g\mu_B(\hat{\mathbf{s}}\hat{\mathbf{B}}). \quad (17.15)$$

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 симметричную части:

$$\begin{aligned} \hat{V}_{s=0}^{(2)} &= -\frac{ie}{mc}k_i r_i \hat{A}_j(0)\hat{p}_j = \hat{V}_a^{(2)} + \hat{V}_s^{(2)}, \\ \hat{V}_a^{(2)} &= -\frac{iek_i \hat{A}_j(0)}{2mc}(\hat{r}_i \hat{p}_j - \hat{r}_j \hat{p}_i), \quad \hat{V}_s^{(2)} = -\frac{iek_i \hat{A}_j(0)}{2mc}(\hat{r}_i \hat{p}_j + \hat{r}_j \hat{p}_i). \end{aligned}$$

Антисимметричное слагаемое содержит компоненту вектора момента импульса  $(\hat{r}_i \hat{p}_j - \hat{r}_j \hat{p}_i) = e_{ijk} \hat{L}_k \equiv e_{ijk} \hat{h} \hat{\ell}_k$ . В итоге это слагаемое преобразуется к виду (ср. (11.12))

$$\hat{V}_a = -\frac{i\epsilon\hbar}{2mc}(\hat{\ell}[\mathbf{k} \hat{\mathbf{A}}(0)]) \equiv -\mu_B(\hat{\ell} \hat{\mathbf{B}}(0)).$$

Вторая форма здесь получена с помощью (14.17). Окончательно, добавляя ещё слагаемое, содержащее спин, мы получаем оператор, содержащий магнитный момент системы,

$$\hat{V}_a^{(2)} = -\hat{\mathbf{m}}\hat{\mathbf{B}}(0), \quad \hat{\mathbf{m}} = \mu_B(\hat{\ell} + g\hat{\mathbf{s}}). \quad (17.16)$$

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 (17.7):

$$\begin{aligned} &\frac{e}{2}\langle\psi_d|(r_i \hat{p}_j + r_j \hat{p}_i + \hat{p}_j r_i + \hat{p}_i r_j)|\psi_u\rangle = \\ &= \frac{ime}{2\hbar}\langle\psi_d|(r_i \hat{H} r_j - r_i r_j \hat{H} + r_j \hat{H} r_i - r_j r_i \hat{H} + \hat{H} r_j r_i - r_j \hat{H} r_i + \hat{H} r_i r_j - r_i \hat{H} r_j)|\psi_u\rangle \equiv \\ &\equiv \frac{ime}{2\hbar}\langle\psi_d|(-r_i r_j \hat{H} - r_j r_i \hat{H} + \hat{H} r_j r_i + \hat{H} r_i r_j)|\psi_u\rangle = \\ &= \frac{ime}{\hbar}(E_d - E_u)\langle\psi_d|r_i r_j|\psi_u\rangle = \\ &= -im\omega_{ud}\langle\psi_d|r_i r_j|\psi_u\rangle \equiv -\frac{im}{3}\omega_{ud}\langle\psi_d|Q_{ij}|\psi_u\rangle + G\delta_{ij}, \end{aligned}$$

где  $Q_{ij} = e(3r_i r_j - r^2 \delta_{ij})$ ,  $G = -\frac{ime}{3}\omega_{ud}\langle\psi_d|r^2|\psi_u\rangle$ .

Здесь  $Q_{ij}$  — квадрупольный момент системы.

Подставляя полученное выражение в симметричную часть оператора взаимодействия (17.15) с учётом (14.17), можно записать это взаимодействие в виде<sup>1</sup>

$$\hat{V}_s^{(2)} = -\frac{Q_{ij}}{6} \frac{\partial \hat{\mathcal{E}}_i}{\partial r_j}(0). \quad (17.17)$$

Это выражение определяет *электрическое квадрупольное излучение*.

Вычисляя, наконец, матричные элементы (17.8) этих двух слагаемых по состояниям (частица + поле) с учётом (14.17), (14.21), найдём

$$V_{du,a}^{(2)} = -\frac{i\omega_{du}}{c} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega L^3}} \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda} \mathbf{m}_{du}, \quad (17.18a)$$

$$V_{du,s}^{(2)} = -\frac{i\omega_{du}}{6c} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega L^3}} \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1} \cdot \varepsilon_{\mathbf{k}\lambda;i} k_j Q_{ij,du}, \quad (17.18b)$$

При  $n_{\mathbf{k}\lambda} = 0$  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 (17.12). Из окончательного ответа объём  $L^3$  выпадает. Получающийся результат совпадает с результатом классической электродинамики (с учётом видоизменения, обсуждавшегося в конце разд. 17.1.3).

По построению ясно, что

а) чётности 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) запрещёнными*.

▼ Иногда оказывается, что обращаются в ноль и матричные элементы, входящие в (17.18). В этом случае приходится учитывать следующие члены разложения экспоненты  $e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r})}$  по  $(\mathbf{k}\mathbf{r})$ . Принято говорить, что  $N$ -му члену разложения экспоненты  $e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r})}$  по  $(\mathbf{k}\mathbf{r})$  отвечают магнитный мультипольный переход (MN) и электрический мультипольный переход (EN + 1).

В частности, при  $N = 0$  мы имеем электрический дипольный переход (E1), при  $N = 1$  — магнитный дипольный переход (M1) и элек-

<sup>1</sup>Слагаемое  $G$  выпало, ибо коэффициент при нём есть  $\delta_{ij} k_i A_j \propto (\mathbf{k}\boldsymbol{\varepsilon}) = 0$ .

трический квадрупольный переход (E2). В следующем за рассмотренным порядке по  $(\mathbf{k} \mathbf{r})$  ( $N = 2$ ) 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 запрещённые переходы*).

Итак, в отсутствие запретов для спонтанного излучения с частотой  $\omega \sim \omega_0 = Ry/\hbar$

$$r_{ud}^{EN} \sim r_{ud}^{E1} (ka)^{2(N-1)} \lesssim r_{ud}^{E1} \alpha^{2(N-1)}, \quad r_{ud}^{MN} \sim r_{ud}^{E1} (ka)^{2N} \lesssim r_{ud}^{E1} \alpha^{2N}. \quad (17.19)$$

Иными словами, переходы высокой мультипольности очень маловероятны, это — двукратно, трёхкратно и т. д. запрещённые переходы. Как и в классической электродинамике, скорости переходов (MN) и (E N+1) — одного порядка<sup>1</sup>.

Если свойства симметрии системы таковы, что кажется возможным только сильно запрещённый переход, вероятность реального перехода может оказаться больше рассмотренной выше, поскольку более «выгодным» станет процесс с нерезонансным излучением пары фотонов (при фиксированной законом сохранения их суммарной энергии) за счёт слагаемого  $e^2 \mathbf{A}^2 / (2mc^2)$  в гамильтониане (11.7).

### § 17.3. Правила отбора для излучения

В (17.6), (17.12) (17.14) 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 неисчезающих матричных элементов при таких переходах даются правилами отбора для векторных операторов (разд. 12.2.1), которые для электрических дипольных  $E1$  переходов читаются как хорошо известные условия: моменты состояний  $u$  и  $d$  отличаются не более чем на 1, а их чётности противоположны. Схожая аргументация относится и к излучению высших мультиполей.

<sup>1</sup>Переходы между близко расположенными уровнями, для которых частота излучения  $\omega \ll \omega_0$ , дополнительно подавлены множителями  $(\omega/\omega_0)^{3+2(N-1)}$  или  $(\omega/\omega_0)^{3+2N}$  соответственно. В большинстве случаев рассмотрение этих переходов лишено смысла в силу их чрезвычайно малой вероятности.

Пусть полные моменты состояний  $|u\rangle$  и  $|d\rangle$  равны соответственно  $j_u$  и  $j_d$ , а их чётности это  $P_u$  и  $P_d$ . Тогда (с учётом правил сложения моментов и сохранения чётности) выполняются *правила отбора*:

$$\begin{aligned} \text{для } (EN) \text{ излучения} \quad & |j_d - j_u| \leq N, \quad P_u \cdot P_d = (-1)^N, \\ \text{для } (MN) \text{ излучения} \quad & |j_d - j_u| \leq N, \quad P_u \cdot P_d = (-1)^{N+1}. \end{aligned} \quad (17.20)$$

Для  $N \geq 3$  эти правила отбора должны читаться как  $|j_d - j_u| = N$ . Действительно, при меньших  $|j_d - j_u|$  допустимо излучение со значительно более вероятными переходами меньшей мультипольности.

**Правила отбора для электрического дипольного перехода можно понимать как следствие того, что фотон — это частица со спином 1**, при таком переходе фотон уносит наименьший возможный момент импульса, равный 1. Мультипольные переходы отвечают излучению фотонов, имеющих, помимо спина, ещё и дополнительный орбитальный момент вокруг какой-то оси, связанной с устройством излучающей системы.

▽ 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, чем разрешённые дипольные переходы.

## § 17.4. Ширина спектральной линии

### 17.4.1. Собственная ширина уровня.

#### Что такое наблюдаемый фотон

- 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. Учёт запаздывания фактически вводит дополнительное взаимодействие с электромагнитным полем вне ядер и электронов. Это взаимодействие ничтожным образом смещает уровни энергии. Более важно, что в этом приближении уровни перестают быть в точности стационарными, необходимо учитывать обсуждавшуюся выше возможность спонтанного перехода с верхнего уровня  $u$  на один из нижних  $d$  с одновременным излучением фотона частоты  $\omega_{ud}$ . Скорость этих переходов при электрическом дипольном излучении описывает-

ся соотношением (17.6), (17.14). Эта скорость определяет *парциальную ширину спектральной линии*  $\Gamma_{ud} = \hbar r_{ud}$ .

*Собственная ширина уровня*  $\Gamma_c$  (она же — *полная*) определяется полной скоростью уходов с уровня  $u$ . Она даётся суммированием по всем нижележащим уровням  $d$  (т. е. это — сумма парциальных ширин  $\Gamma_{ud}$ ). Она связана с временем жизни  $\tau_c$  соотношениями (ср. (2.43)):

$$r_c = \sum_d r_{ud}, \quad \tau_c = \frac{1}{r_c}, \quad \Gamma_c = \sum_d \Gamma_{ud} = \frac{\hbar}{\tau_c} \equiv \hbar \cdot r_c. \quad (17.21)$$

Итак, состояние, из которого происходит излучение, нестационарно<sup>1</sup>, оно имеет конечную ширину по энергии  $\Gamma_c$  (и соответственно по частоте  $\Delta\omega_c = \Gamma_c/\hbar$ ). Поэтому **волновая функция фотона**, *излучаемого в атомном переходе*, — **не монохроматическая плоская волна**, а **волновой пакет** с разбросом  $\Gamma_c$  по энергиям (т. е. с длиной  $\Lambda_c = c\tau \equiv \hbar c/\Gamma_c$ ) и с угловым распределением, например (17.6). В оптике говорят об этом пакете как о цуге волн длиной  $\Lambda_c$ .

Вспоминая выражение частоты через длину волны  $\omega = 2\pi c/\lambda$ , выразим ещё ширину спектральной линии по длине волны через собственную ширину уровня

$$\Delta\lambda_c = \lambda^2 \Gamma_c / 2\pi \hbar c \equiv \lambda^2 / (2\pi \Lambda_c). \quad (17.22)$$

• Используя (17.6), получим сначала грубую оценку парциальной ширины уровня, обусловленной  $E1$  переходом (ниже мы опускаем значок  $_{ud}$  у частоты):

$$\Gamma_{ud} \sim \hbar \omega \frac{e^2 \omega^2}{\hbar c^3} \langle |\mathbf{r}|^2 \rangle \sim \hbar \omega \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right) \left( \frac{\omega a}{c} \right)^2 \sim \hbar \omega \alpha (ka)^2. \quad (17.23)$$

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  $(\Gamma/\hbar\omega) \sim \alpha^3$ .

◇ Для сферически симметричной системы удобно записать матричный элемент дипольного перехода в виде произведения

$$d_{ud} = e r_{fi}(\ell, \ell') c(\ell, \ell'),$$

$$r_{fi}(\ell, \ell') = \left( \int R_{u\ell} r R_{d\ell'} r^2 dr \right), \quad c(\ell, \ell') = \left( \int Y_{10}^* \cos \theta Y_{\ell 0} d\Omega \right). \quad (17.24)$$

<sup>1</sup>Такие состояния обсуждались в § 2.8.

Здесь  $R_{u\ell}$  и  $R_{d\ell'}$  — радиальные волновые функции начального и конечного состояний с различными  $\ell$ , и принято  $m' = m = 0$ .

Далее мы вычислим некоторые ширины для атома водорода. При этом полезно помнить, что  $1Ry = e^2/2a_B$  (теорема о вириале).

◇ Вычислим ширину  $\Gamma_{21}$  для перехода  $2p \rightarrow 1s$  ( $\ell = 1, \ell' = 0$ ). В этом случае  $\hbar\omega_{ud} = (3/4)Ry$ , а матричный элемент (17.24) вычисляется с помощью (9.22). При этом  $c(1,0) = \int Y_{1,0}^* \cos\theta Y_{0,0} d\Omega = i\sqrt{3}$  и

$$r_{21}(1,0) = \int \left( \frac{r e^{-r/2a_B}}{\sqrt{24a_B^5}} \right) r \left( \frac{2e^{-r/a_B}}{\sqrt{a_B^3}} \right) r^2 dr = a_B \frac{2^{15/2}}{3^6}.$$

Собирая все коэффициенты из (17.6), (17.24), найдём

$$\Gamma_{21} = \left( \frac{4}{3} \frac{2^{15}}{3^{10}} \right) \alpha \frac{[(3/4)(Ry/\hbar)]^2 a_B^2}{c^2} \hbar\omega = \frac{2^{11}}{3^9} \alpha^3 \approx 0,1 \alpha^3 \hbar\omega.$$

◇ Выполним оценку для переходов из состояния  $|n+1, \ell = n, m\rangle$  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 изучаемых состояний  $E_u = -Ry/(n+1)^2$  и  $E_d = -Ry/n^2$ , т. е.  $\omega_{ud} \approx 2Ry/\hbar n^3$ . Матричный элемент  $z_{ud}$  близок к радиусу соответствующей орбиты  $a_B n^2$  (разд. В.4). В итоге оценка (17.23) принимает вид

$$\Gamma \sim \alpha \frac{[Ry/(\hbar n^3)]^2 (a_B n^2)^2}{c^2} \hbar\omega \sim (\alpha^3/n^2) \hbar\omega \sim (\alpha^3/n^5) Ry, \quad (17.25)$$

с ростом  $n$  ширина рассматриваемого уровня становится всё 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 нижележащих уровней со значительно большими частотами переходов (см. задачу 16.2).

Найдём собственную ширину уровня  $|u\rangle \equiv |n, 1, 0\rangle$  при  $n \gg 1$ . Основной вклад в эту ширину даёт переход в основное состояние  $|d\rangle \equiv |n, 1, 0\rangle \rightarrow |f\rangle \equiv |1, 0, 0\rangle$ , для которого частота перехода  $\omega = Ry(1 - 1/n^2)/\hbar \approx Ry/\hbar$ . В этом случае в матричном элементе перехода (17.24)  $d_{fi} = e r_{n1}(1,0) c(1,0)$ . Как мы нашли выше,  $c(1,0) = i\sqrt{3}$ . Для вычисления радиального интеграла  $n1(1,0)$  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  $R_{n,1}$

её асимптотическое представление (9.18), после чего легко получается  $r_{n1}(1, 0) = 8a_B n^{-5/2}$ . В итоге

$$\Gamma = \frac{4e^2 \omega^3}{c^3} |c_{fi}|^2 |r_{fi}|^2 = \frac{4 \cdot 64e^2 R_y^3 a_B^2}{3\hbar^3 c^3 n^5} = \alpha^3 R_y \frac{64}{3n^5}. \quad (17.26)$$

Эта парциальная ширина — того же порядка, что и ширина, связанная с переходом на близко лежащий уровень (17.25). Полная ширина уровня складывается из  $n - 1$  парциальных ширин излучения с переходами на все нижележащие уровни, каждая из которых имеет примерно одинаковую величину.

#### 17.4.2. Наблюдаемая ширина спектральной линии. Когерентность

◇ Обсудим, как наличие конечной ширины влияет на явление интерференции, обсуждавшееся в курсе ЭЛЕКТРОДИНАМИКА. Для

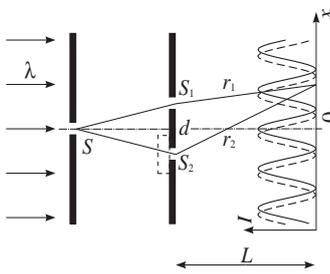


Рис. 13. Схема Юнга интерференции волн

этого рассмотрим простейшую схему (Юнга) по наблюдению интерференции в оптике. Плоская волна от монохроматического 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, прошедших через разные щели в точку

экрана с координатой  $x$  по отношению к проекции середины расстояния между щелями  $O$ , различаются на величину  $kxL/d$ , где  $k$  — волновой вектор. Это приводит к интерференционной картине с максимумами, расположенными на расстоянии  $\lambda L/d$  друг от друга.

Наблюдаемая интерференционная картина возникает из суммирования вкладов от тех фотонов, испущенных в разных точках источника и в разное время, для каждого из которых их начальная разность хода не превышает  $\Lambda_c$ . Остальные фотоны дают при усреднении равномерный фон.

В каждой точке интерференционный максимум размазан, и для  $n$ -го максимума величина размазки достигает  $n\Delta\lambda_c L/d$  даже для одного

фотона. При  $n \approx (1/2)\lambda/\Delta\lambda_c$  размазанный  $n$ -й максимум смыкается с  $n + 1$ -ым максимумом, интерференционные полосы исчезают. Это интерпретируется, как потеря когерентности. Иными словами, максимальная разность хода, показывающая интерференцию составляет  $\mathcal{L} = n\lambda = \lambda^2/(2\Delta\lambda_c)$ . Сравнение с (17.22) показывает, что  $\mathcal{L} = \pi\Lambda_c$ . Таким образом, длина цуга (с точностью до множителя  $\pi$ ) может трактоваться как длина когерентности (см. также обсуждение в [21]).

◇ Видимое уширение спектральной линии  $\Gamma_{\text{vis}}$  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, (15.1). Для излучения видимого света при комнатной температуре последнее отношение составляет примерно  $10^{-6}$ , т. е. тепловое уширение линии больше уширения линии каждого излучённого кванта, определяемого собственной шириной. Поэтому прямое измерение собственной ширины линии обычно — трудная задача. При повышении плотности время жизни возбуждённого состояния уменьшается из-за соударений (*ударное уширение*), в конденсированных средах — из-за взаимодействий с соседями. Соответствующим образом меняется (обычно уменьшается) и длина когерентности.

## § 17.5. Принципы работы лазеров. Простейший вариант

Рассмотрим тело, чьи атомы (или молекулы) имеют возбуждённые состояния  $u$  с запрещённым 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 (*заселённости*) и через  $E_{ud} = \hbar\omega_{ud}$  энергию возбуждения (разность энергий уровней). В термодинамическом равновесии заселённость 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 заселённость*  $N(u) > N(d)$  (один из способов её создания мы обсудим далее). Поскольку переход

$u \rightarrow d$  запрещён, система может довольно долго оставаться в этом состоянии (*состояние с отрицательной температурой*).

Направим по этому телу луч света (пучок фотонов) с частотой  $\omega_{ud}$ . Под действием поля этих фотонов к очень маловероятному (запрещённому) спонтанному излучению добавится вынужденное излучение, которое усиливается (пропорционально  $n$ ) по мере прохождения вещества, поскольку к первоначальным фотонам пучка будут добавляться всё новые излучённые фотоны. Если это тело представляет собой сплошной цилиндр, ограниченный параллельными зеркалами, то при обратном прохождении света сигнал ещё усилится и т. д., до тех пор пока инверсная заселённость 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 распространённых способов создания инверсной заселённости — оптическая накачка. Она возможна, если в наших атомах в дополнение к паре уровней  $d$  и  $u$  существует ещё вышележащий уровень  $g$  ( $E_g > E_u > E_d$ ), причём переходы  $g \rightarrow u$ ,  $g \rightarrow d$  — разрешённые. Для накачки система освещается интенсивным источником монохроматического света, среди характерных частот которого есть и  $\omega_{gd}$ . Забудем на минуту о существовании уровня  $u$ . Тогда под воздействием накачки средние заселённости уровней  $g$  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  $g$  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 всё больше атомов, а заселённости состояний  $d$  и  $g$  становятся всё меньше — создаётся необходимая инверсная заселённость.

## § 17.6. Задачи

1. Найти собственную (радиационную) ширину 1-го возбуждённого уровня заряженного трёхмерного осциллятора

$$\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m) + m\omega^2 \mathbf{r}^2/2.$$

2. Найти собственную (радиационную) ширину состояний атома водорода  $|2, 1, 0\rangle$ ,  $|3, 1, 0\rangle$  и  $|n\ell = n - 1, m\rangle$ . Сравнить её 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. а) Для перехода  $|2, 1, m\rangle \rightarrow |1, 0, 0\rangle$  в атоме водорода определить  $dw/d\Omega$ ,  $w$ ,  $\tau$ ,  $\Gamma$  и поляризацию излучённого фотона.

б) Как изменится этот ответ при наличии нескольких фотонов с частотой перехода в начальном состоянии электромагнитного поля?

4. а) Перечислить возможные дипольные переходы между уровнями  $n = 3$  и  $n = 2$  атома водорода ( $\alpha$ -линия серии Бальмера) с учётом их тонкой структуры.

б) Используя выражения для собственных функций атома водорода (8.31), найти собственную (радиационную) ширину всех состояний атома водорода с  $n = 3$ .

5. Атом водорода находится в постоянном однородном магнитном поле  $B$ . Рассмотреть переходы  $2p_{1/2} \rightarrow 1s_{1/2} + \gamma$ . Каковы поляризации и частоты фотонов, летящих: а) вдоль поля, б) перпендикулярно полю, если энергия взаимодействия с полем мала или велика по сравнению с интервалами тонкой структуры? Каковы относительные интенсивности спектральных линий?

## Глава 18

# Рассеяние

### § 18.1. Постановка задачи. Общие соотношения

В задаче рассеяния рассматриваются две частицы, первоначально удалённые друг от друга на большое расстояние. Требуется определить возможные конечные состояния и вероятности перехода в каждое из них. Подобная задача обсуждалась в § 2.7, однако в специфике одномерного случая трудно разглядеть черты реальной трёхмерной задачи.

В § 9.1 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 тяжёлым) притягивающим или отталкивающим центром. Именно эта задача и является основным объектом изучения ниже.

В силу принципа суперпозиции за начальное состояние можно принять волну любого вида. Принято выбирать начальное состояние с неизменным потоком падающих частиц, движущихся из бесконечности, в виде стационарной плоской волны<sup>1</sup> частиц с импульсом  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \equiv \hbar(0, 0, k)$ . Мы ищем вероятности переходов — отношения потока рассеянных или рождённых частиц к потоку падающих частиц.

#### 18.1.1. Амплитуда рассеяния. Сечение рассеяния

• Рассмотрим подробно *упругое рассеяние*, т. е. случай, когда взаимодействие с рассеивателем порождает только расходящуюся сферическую волну, в которой импульсы частиц  $\mathbf{p}'$  направлены по радиусу от центра:

$$\mathbf{p} \equiv \hbar\mathbf{k} = (0, 0, \hbar k), \quad \mathbf{p}' \equiv \hbar\mathbf{k}' = \hbar k(\mathbf{r}/r), \quad E = p^2/2m, \quad \lambda = 2\pi/k. \quad (18.1)$$

Угол между векторами  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{p}'$  называют *углом рассеяния*  $\theta$ .

<sup>1</sup>Иногда удобнее другой выбор — *цилиндрическая волна, волновые пакеты, ...*

Обозначим через  $a$  размер области, где существенно отличие потенциала взаимодействия  $V(r)$  от нуля<sup>1</sup>. Вдали от рассеивателя, при  $r \gg a, \lambda$ , волновая функция должна быть суперпозицией падающей плоской волны  $e^{ikz}$  и рассеянной расходящейся сферической волны:

$$\psi = \psi_{\text{пад}} + \psi_{\text{рас}} = e^{ikz} + f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \cdot \frac{e^{ikr}}{r} \quad \text{при } r \gg a, \lambda. \quad (18.2)$$

Это соотношение можно рассматривать как граничное условие для уравнения Шредингера

$$(\Delta + k^2)\psi(\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r}), \quad \Phi(\mathbf{r}) = (2m/\hbar^2)V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}), \quad (18.3)$$

подобное условию (2.32) для одномерной задачи рассеяния.

Введённую в (18.2) величину  $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  называют **амплитудой рассеяния**. Её исследование — основная задача теории рассеяния. (Нередко пишут  $f(k, \theta)$  вместо  $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  и используют тождество  $k\mathbf{r} \equiv (\mathbf{k}'\mathbf{r})$ .)

**Поток вероятности и сечение.** Вычислим поток вероятности (2.4) на больших расстояниях, где справедлива асимптотика (18.2):

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = \mathbf{j}_{\text{пад}} + \mathbf{j}_{\text{инт}} + \mathbf{j}_{\text{рас}}. \quad (18.4a)$$

Учитывая, что  $\nabla e^{ikz} = i\mathbf{k}e^{ikz}$  и  $\nabla[e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}/r] = [i\mathbf{k}' - \frac{\mathbf{r}}{r^3}][e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}/r]$ , найдём потоки падающих и рассеянных частиц,  $\mathbf{j}_{\text{пад}}$  и  $\mathbf{j}_{\text{рас}}$  и интерференционный поток  $\mathbf{j}_{\text{инт}}$ :

$$\mathbf{j}_{\text{пад}} = \frac{\hbar\mathbf{k}}{m}; \quad \mathbf{j}_{\text{рас}} = \frac{\hbar\mathbf{k}'}{mr^2}|f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2; \quad (18.4b)$$

$$\mathbf{j}_{\text{инт}} = \frac{\hbar}{2mr}(\mathbf{k} + \mathbf{k}') [f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - k\mathbf{r})} + f^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}')e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - k\mathbf{r})}].$$

В выражении  $\mathbf{j}_{\text{инт}}$  отброшены слагаемые, убывающие с ростом расстояния быстрее выписанного.

◇ *Полный поток, рассеянный в телесный угол  $d\Omega$  (кроме  $\theta=0$ ), есть*

$$dJ_{\text{рас}} = j_{\text{рас}}r^2 d\Omega = (\hbar k/m)|f|^2 d\Omega.$$

<sup>1</sup>Этот размер задаётся формой взаимодействия. Для ядерных сил  $V(r) \sim e^{-r/a}/r$ , где  $a \sim 10^{-13}$  см.

Его отношение к плотности потока падающих частиц называют **дифференциальным сечением упругого (*elastic*) рассеяния**:

$$d\sigma_{\text{el}} = dJ_{\text{рас}}/j_{\text{пад}} \equiv |f|^2 d\Omega. \quad (18.5)$$

Соответственно, полное **сечение упругого рассеяния**<sup>1</sup> есть

$$\sigma_{\text{el}} = \int d\sigma_{\text{el}} = \int |f|^2 d\Omega. \quad (18.6)$$

Если при столкновении не появляется новых частиц или состояний (неупругих процессов нет), эпитет «упругое» при описании сечений можно отбросить.

▽ Рассмотрим падение потока частиц  $a$  с массами  $m_a$  и импульсами  $\mathbf{p}_a$  на частицах мишени  $b$  с массами  $m_b$ . После азимутального усреднения средняя потеря импульса  $\Delta\mathbf{p}_a$  составляет  $\Delta\mathbf{p}_a = -\frac{m_b}{m_a + m_b}\mathbf{p}_a$ . Для таких задач удобно использовать понятие *транспортного сечения*

$$\sigma_{\text{tr}} = \int (1 - \cos\theta) d\sigma. \quad (18.7)$$

В этом объекте вклад рассеяния на малые углы (вклад больших прицельных параметров) подавлен по сравнению с вкладом рассеяния на большие углы.

• Нередко часть падающих частиц после столкновения с рассеивателем меняет свою энергию или исчезает (при рассеянии электрона на атоме последний может перейти в возбуждённое состояние, позаимствовав энергию у электрона; при столкновении с ионом электрон может поглотиться с образованием атома и испусканием фотона и т. п.). В стационарном режиме поглощённые частицы не накапливаются в рассеивателе, потоки этих «переродившихся» частиц — также расходящиеся волны, подобные (упругой) рассеянной волне. В таком случае величины, подобные (18.6), называют **сечениями неупругих каналов реакции**, их сумма и составляет сечение неупругого (*inelastic*) рассеяния  $\sigma_{\text{in}}$ . **Полное сечение** — это сумма

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{in}}. \quad (18.8)$$

<sup>1</sup>См. для сравнения обсуждение в разд. 16.3.1.

◆ В полный интерференционный поток  $J_{\text{инт}} = \oint \mathbf{j}_{\text{инт}} d\mathbf{S}$  входит только амплитуда упругого рассеяния (остальные состояния не интерферируют с падающей волной). Подставим в этот интеграл определение (18.4b) и выражение для элемента телесного угла  $dS = r^2 d \cos \theta d\phi$ :

$$J_{\text{инт}} = \frac{\hbar k}{2m} \int (1 + \cos \theta) \mathcal{N} r dr d \cos \theta d\phi,$$

$$\mathcal{N} = f(k, \theta) e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - k r)} + f^*(k, \theta) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - k r)}.$$

Выполним теперь интегрирование по  $d\phi$  и замену  $x = \cos \theta$ .

Математическая вставка

Рассмотрим при  $r \rightarrow \infty$  интеграл

$$J = \int_{-1}^1 e^{i k r x} g(x) dx. \quad (18.9)$$

Проинтегрируем его по частям:

$$J = (1/i k r) e^{i k r x} g(x) \Big|_{-1}^1 - (1/i k r) \int_{-1}^1 e^{i k r x} g'(x) dx.$$

Повторение этой процедуры даёт ряд по  $1/r$ . При больших  $r$  в этом ряду достаточно удержать только первый член, что даёт

$$J = (1/i k r) [e^{i k r} g(1) - e^{-i k r} g(-1)]. \quad (18.10)$$

Применяя полученный результат к функции  $J_{\text{инт}}$ , для которой мы обозначили  $f(k, \theta)(1 + \cos \theta) = g(\cos \theta)$ , получим

$$J_{\text{инт}} = \frac{2\pi\hbar}{im} (f^*(k, \theta=0) - f(k, \theta=0)) = -\frac{4\pi\hbar}{m} \text{Im} f(k, 0). \quad (18.11)$$

*Описание потоков частиц плоскими волнами — это, конечно, идеализация. В действительности потоки частиц образуют волновые пакеты (1.2), и физические амплитуды рассеяния представляют собой свёртки 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 из-*

менении волнового вектора в пределах пакета. В таком случае понятие сечения рассеяния неприменимо для описания экспериментальных данных, наблюдаемые величины зависят от соотношения между распределением частиц в сталкивающихся сгустках и характерными длинами их волн. Это явление наблюдалось как большой эффект в тормозном излучении сравнительно низкоэнергетических фотонов в ИЯФ СО РАН (Новосибирск, 1982). Ниже мы не рассматриваем эту возможность.

### 18.1.2. 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 должен совпадать с полным приходом.

Проинтегрируем полный поток  $j$  (18.4b) по поверхности сферы большого радиуса. Источников при конечных  $r$  нет, поэтому должно быть  $\oint j dS = 0$ . Вклад падающего потока в этот интеграл обращается в нуль. Следовательно, должно быть

$$\oint j dS \equiv 0 \Rightarrow J_{\text{инт}} + J_{\text{рас}} = 0.$$

В  $J_{\text{рас}}$  следует учесть потоки частиц во всех конечных состояниях, т. е.  $J_{\text{рас}} = (\hbar k/m)\sigma_{\text{tot}}$ . Подставив сюда ещё  $J_{\text{инт}}$  из (18.11), получаем **оптическую теорему** — важнейшее *следствие сохранения вероятности*:

$$\text{Im } f_{\text{el}}(k, 0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}}. \quad (18.12)$$

(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 вперёд. Это обеспечивает сохранение вероятности — в полной аналогии с сохранением вероятности в одномерном случае (2.33). 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 удаётся прямо измерить полное сечение с хорошей

точностью. В этом случае нередко оказывает помощь оптическая теорема. Для упругого рассеяния удаётся определить амплитуду рассеяния на угол ноль, и полное сечение находят отсюда с помощью (18.12).

### 18.1.3. Конечность полного сечения

Напомним сначала смысл понятия сечения рассеяния в классической теории. Пусть частицы, летящие из бесконечности на рассеивающий центр и имеющие прицельный параметр  $\rho$  (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  $\sigma = \int d\sigma = 2\pi \int \rho d\rho$ . (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*. Во многих классических задачах поля вызывают отклонение (хотя бы и очень небольшое) на сколь угодно больших расстояниях от рассеивателя, поэтому классические полные сечения в таких задачах бесконечны.

◇ Полезно оценить зависимость угла отклонения от прицельного параметра  $\theta_{\text{кл}}(\rho)$  в классической задаче при больших  $\rho$ , 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 приобретённый поперечный импульс и классический угол отклонения:

$$p_{\perp\text{кл}} = -\frac{\rho}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \sim \frac{1}{v} V(\rho) \Rightarrow \theta_{\text{кл}} = \frac{p_{\perp}}{p} \sim \frac{V(\rho)}{pv} \sim \frac{V(\rho)}{E}. \quad (18.13)$$

◇ В квантовом случае угол рассеяния, отвечающий прицельному параметру  $\rho$ , имеет неопределённость, доставляемую соотношением неопределённостей. Соответствующая неопределённость поперечного импульса  $\Delta p_{\perp} \geq \hbar/\Delta r_{\perp} > \hbar/\rho$ , в итоге квантовая неопределённость угла отклонения составляет

$$\theta_{\text{квант}} \sim \Delta p_{\perp}/p_z > (\hbar/\rho p).$$

Пусть при  $r \rightarrow \infty$  поле убывает с расстоянием быстрее, чем  $1/r$ , т. е.

$$rV(r) \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad r \rightarrow \infty. \quad (18.14)$$

(Это справедливо для ядерных сил, а также и для электростатического взаимодействия, если рассеиватель электрически нейтрален — атом или молекула.) В этом случае при больших  $\rho$ , начиная с некоторого  $\rho_0$ , классический угол рассеяния становится меньше квантовой неопределённости этого угла  $\theta_{\text{квант}} > \theta_{\text{кл}}$ . При этом рассеяние заметить невозможно, и полное сечение  $\sigma \lesssim \pi\rho_0^2$ , т. е. конечно.

## § 18.2. Интегральная форма уравнения Шредингера

Уравнение Шредингера (18.3) можно записать в операторном виде как уравнение Липпмана–Швингера

$$\psi^\pm = \psi^0 + \frac{1}{E - \hat{H}_0 \pm i0} \hat{V} \psi^\pm. \quad (18.15a)$$

В этой форме потребовалось определить ещё путь обхода полюса в знаменателе (слагаемое  $\pm i0$ ) и решаемую задачу. Знак  $-$  означает, что уравнение определяет сходящуюся волну, знак  $+$  — расходящуюся. Используя теперь (18.1) и переходя к импульсному представлению с учётом конечности радиуса взаимодействия, можно получить уравнение Липпмана–Швингера для амплитуды рассеяния (где  $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}|$ )

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} V(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + \int \frac{V(\mathbf{p}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k}, \mathbf{p})}{E - \mathbf{p}^2/2m + i0} \frac{d^3\mathbf{p}}{(2\pi)^3}. \quad (18.15b)$$

◇ Попросту говоря, оператор  $(E - \hat{H}_0 \pm i0)^{-1}$  означает просто функцию Грина (соответственно запаздывающую или опережающую) уравнения Шредингера в форме (18.3), понимаемого как неоднородное уравнение  $\Delta\psi + k^2\psi = \Phi(\mathbf{r})$ . Используя далее известную функцию Грина для оператора  $\Delta + k^2$  и граничное условие (18.2), запишем решение в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{1}{4\pi} \int d^3\mathbf{r}' \Phi(\mathbf{r}') \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}.$$

Подставляя сюда выражение для  $\Phi(\mathbf{r})$ , находим интегральную форму уравнения Шредингера — простую реализацию (18.15a):

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r}' \frac{V(\mathbf{r}') e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \psi(\mathbf{r}')} \quad (18.16)$$

◇ При  $r \gg a$  отличим  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  от  $r$  в знаменателе можно пренебречь. Для показателя экспоненты следует выписать более аккуратное разложение. С учётом (18.1) найдём

$$k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = k\sqrt{r^2 - 2\mathbf{r}\mathbf{r}' + r'^2} \simeq k(r - \mathbf{r}\mathbf{r}'/r) = kr - \mathbf{k}'\mathbf{r}'.$$

В итоге уравнение (18.16) переходит в соотношение (18.2) с

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'). \quad (18.17)$$

Далее (только для упрощения вида выкладок) мы считаем поле  $V(r)$  сферически симметричным.

### § 18.3. Борновское приближение

При решении задачи рассеяния часто используют *борновскую теорию возмущений*, в которой потенциальная энергия рассматривается как возмущение. Если в теории возмущений для стационарных состояний, § 5.3, в качестве невозмущённой задачи можно было *выбирать* любую точно решаемую задачу (незвизрая на погрешности в определении параметров базового гамильтониана), то в задаче рассеяния за невозмущённую принимают только задачу о свободном движении, которая почти всегда реализуется на 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, § 5.3, она отвечает следующей последовательности действий. Положим  $V \rightarrow \varepsilon V$  и разложим волновую функцию в ряд по степеням  $\varepsilon$

$$\psi = \psi^{(0)} + \varepsilon\psi^{(1)} + \dots + \varepsilon^k\psi^{(k)} + \dots, \quad \psi^{(0)} = e^{ikz}. \quad (18.18)$$

Затем в уравнении (18.16) приравняем вклады с одинаковыми степенями  $\varepsilon$ , последовательно определим  $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}, \dots$  и соответствующие

вклады в амплитуду рассеяния (18.17), в конце перейдём к пределу  $\varepsilon \rightarrow 1$ .

Получающийся ряд называют борновским. Можно говорить, что  $n$ -ый член ряда описывает  $n$ -кратное взаимодействие с рассеивателем ( $n$ -ая степень потенциала). Нередко борновским приближением называют только первый член этого ряда.

### 18.3.1. Первое борновское приближение

Чтобы получить амплитуду рассеяния в первом порядке, подставим под интеграл (18.17) вместо  $\psi(\mathbf{r})$  невозмущённую волновую функцию  $\psi^{(0)} = e^{i\mathbf{k}z} \equiv e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ . Полученная амплитуда рассеяния оказывается фурье-образом потенциала (с точностью до множителя). Она зависит только от импульса передачи<sup>1</sup>  $\hbar\mathbf{q}$ :

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \equiv f(q) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} V(\mathbf{r}), \quad (18.19a)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}, \quad q = 2k \sin(\theta/2).$$

Интегрирование по углам (в сферических координатах) даёт

$$f(q) = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty V(r) \sin(qr) r dr. \quad (18.19b)$$

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 (18.19) 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

<sup>1</sup>В следующих порядках теории возмущений добавляется зависимость и от энергии налетающей частицы.

для медленных частиц. С ростом угла  $\theta$  (импульса передачи  $q$ ) осцилляции экспоненты  $e^{iqr}$  (или синуса  $\sin(qr)$ ) под интегралами (18.19) гасят друг друга, и амплитуда быстро убывает. Таким образом, угловое распределение имеет пик шириной  $\theta \sim 1/(ka)$  вблизи направления вперёд и быстро убывает с ростом угла рассеяния.

◇ *Оценим* ещё 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 (18.19а) 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  $n > 2$ .

• **Второе и последующие приближения** получаются прямым применением рецепта, изложенного на стр. 393, т.е. подстановкой разложения (18.18) в уравнение (18.16) и последовательным приравнованием выражений с одинаковыми степенями  $\varepsilon$  при  $r \gg a$ .

### 18.3.2. Критерий применимости приближения

Борновское приближение хорошо описывает рассеяние, если вклад поправки  $\psi^{(1)}$  в амплитуду значительно меньше вклада невозмущённой функции  $\psi^{(0)}$ , или — что то же — в области действия потенциала

$$|\psi^{(1)}| \ll |\psi^{(0)}| \quad \text{при } r < a. \quad (18.20)$$

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  $\bar{V}$ .

Результаты различаются для медленных и для быстрых частиц.

◇ **При  $ka \ll 1$**  импульс налетающей частицы невелик, её длина волны больше характерных размеров рассеивателя. Определим  $\psi^{(1)}$  из интегрального уравнения (18.16). 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 (18.20) принимает вид  $[m/(2\pi\hbar^2)]2\pi a^2 |\bar{V}| \ll 1$ , что можно переписать как  $|\bar{V}| \ll E_{\text{хар}} = \hbar^2/2ma^2$  — среднее значение потенциальной энергии меньше кинетической энергии, обусловленной локализацией внутри размера  $a$ . *Это условие может нарушиться, если в поле притяжения существуют связанные состояния.*

◇ **При  $ka \gg 1$**  частица быстро «проходит через рассеиватель». В этом случае функцию  $\psi^{(1)}$  удобно оценить уже с помощью дифферен-

циального уравнения (18.3)  $(\Delta + k^2)\psi^{(1)} = (2mV(r)/\hbar^2)e^{ikz}$ . Обозначим  $\psi^{(1)} = g(r)e^{ikz}$ . Для функции  $g$  наше 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 уравнение легко решается:

$$\psi^{(1)} = -e^{ikz}(im/k\hbar^2) \int U dz \sim -e^{ikz}(im/k\hbar^2)\bar{V}a.$$

Условие применимости приближения (18.20) приняло теперь простой вид  $\bar{V} \ll \hbar v/a$ , где скорость падающей частицы  $v = \hbar k/m$  — при больших переданных импульсах борновское приближение применимо, если время пролёта частицы через рассеиватель значительно меньше характерного времени изменения состояния рассеивателя  $\hbar/|\bar{V}|$ . Иными словами, неопределённость в энергии, связанная с конечностью времени пролёта через область взаимодействия, должна быть больше энергии взаимодействия. При этом многократные взаимодействия (следующие члены ряда) становятся всё менее вероятными.

◇ Итак, борновское приближение применимо, если

$$|V(a)| \ll \begin{cases} \hbar^2/(ma^2) & \text{при } qa \lesssim 1, \\ \hbar v/a & \text{при } ka > qa \gg 1. \end{cases} \quad (18.21)$$

Типичной является ситуация, когда при больших энергиях борновское приближение справедливо в области больших углов рассеяния и несправедливо при малых углах рассеяния.

◇ Для рассеяния на кулоновском потенциале оценки модифицируются. Потенциал может рассматриваться как возмущение при энергиях  $E \gg 1 Ry$ , т. е. только при достаточно высоких скоростях налетающей частицы  $v \gg \alpha c$  [1], ср. обсуждение в § 16.7.

• Заметим, наконец, что в первом борновском приближении амплитуда рассеяния (18.19b) действительна. В этом приближении оптическая теорема не имеет содержания. Напомним, что в этом приближении амплитуда — порядка  $\varepsilon$ . Поэтому сечение, стоящее в правой части (18.12), — порядка  $\varepsilon^2$ . Таким образом, для проверки или использования оптической теоремы необходимо вычислить амплитуду по крайней мере во втором порядке по  $\varepsilon$ , т. е. во втором борновском приближении.

**18.3.3. Рассеяние на потенциале Юкавы**

Для многих физических задач зависимость потенциальной энергии от расстояния имеет вид

$$V(r) = ge^{-\mu r}/r. \quad (18.22)$$

Такой вид имеет, например, затравочное ядерное взаимодействие (*потенциал Юкавы*), для которого  $\hbar\mu/c$  есть масса частицы — переносчика ядерных взаимодействий ( $\pi$ -мезона) и  $1/\mu$  — радиус действия сил. Такой вид имеет и поле точечного заряда в плазме или металле с учётом экранирования ионами в плазме или из-за перераспределения зарядов в металле.

Простое вычисление интеграла (18.19b) даёт

$$f(q) = -\frac{2mg}{\hbar^2(q^2 + \mu^2)}. \quad (18.23)$$

Отсюда по общим формулам получается

$$d\sigma = \left| \frac{2mg}{\hbar^2(q^2 + \mu^2)} \right|^2 d\cos\theta d\phi \Rightarrow \sigma = \frac{4\pi(2mg)^2}{\hbar^4\mu^2(\mu^2 + 4k^2)}. \quad (18.24)$$

**18.3.4. Формула Резерфорда**

Для кулоновского поля  $V = -Ze^2/r$  борновское приближение непосредственно неприменимо. Чтобы решить задачу, 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 (18.23), вычисленную для потенциала Юкавы (18.22). Переход к пределу  $\mu \rightarrow 0$  даёт искомую амплитуду рассеяния на кулоновском центре. Получающееся дифференциальное сечение не зависит от направления сил (притяжение или отталкивание) и совпадает с классическим ответом:

$$f(q) = \frac{2mZe^2}{\hbar^2q^2} \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{mZe^2}{2p^2 \sin^2(\theta/2)} \right)^2 \equiv \frac{Z^2e^4}{16E^2 \sin^4(\theta/2)}. \quad (18.25)$$

Зависимость от знака взаимодействия обнаруживается только при учёте следующего приближения борновской теории возмущений.

Надёжность использованной процедуры обеспечена тем, что детали экранирования (т. е. способ стремления  $\mu$  к 0) не существенны при описании дифференциального сечения рассеяния на фиксированный угол. При очень малых углах зависимость от деталей экранирования становится существенной.

Точное решение кулоновской задачи даёт точно то же значение для сечения рассеяния, что и первое Борновское приближение (18.25), зато фаза рассеянной волны выглядит совсем по-другому (см. подробнее разд. 18.7).

### 18.3.5. 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  $\mathbf{r}$ . Тогда для фурье-гармоник получается соотношение  $\varphi_{\mathbf{q}} = 4\pi\rho_{\mathbf{q}}/q^2$ . Поэтому

$$f(\mathbf{q}) = -\frac{2me^2}{\hbar^2q^2}F(\mathbf{q}), \quad F(\mathbf{q}) = Z - \int d^3\mathbf{r}e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}n(\mathbf{r}). \quad (18.26)$$

Функцию  $F(\mathbf{q})$  называют атомным формфактором.

- Рассмотрим асимптотики атомного формфактора.

◇ При  $qa \ll 1$  (малые углы) можно разложить экспоненту под интегралом (18.26) в ряд

$$F(q) = Z - \int d^3\mathbf{r}n(r)[1 - i\mathbf{q}\mathbf{r} + i^2(\mathbf{q}\mathbf{r})^2/2 + \dots].$$

Первое слагаемое в ряду под интегралом даёт 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  $\langle r^2 \rangle = \int d^3\mathbf{r} r^2 n(\mathbf{r})$ . В итоге получается  $F(\mathbf{q}) \approx (q^2/6)\langle r^2 \rangle$ . Отсюда получается  $d\sigma/d\Omega = (\langle r^2 \rangle/3a_B)^2$ . (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. В этой области параметров 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

$$F(q) = 1 - \frac{1}{(1+u)^2}; \quad \frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{a_B(1+u/2)^2}{(1+u)^4}; \quad \sigma = \frac{7\pi a_B e^2}{6E}.$$

◇ Простое описание с помощью формфактора хорошо работает до тех пор, пока можно пренебречь смещениями атомных электронов за время пролёта рассеиваемого электрона. Для этого скорость рассеиваемого электрона должна быть больше характерных скоростей атомных электронов, которые по порядку величины составляют  $\alpha c$  (В.23b). При усреднении по ансамблю пролетевших в разное время электронов происходит усреднение по мгновенным позициям атомных электронов, и использование формфактора даёт определяющий вклад в результат.

Если скорость рассеиваемого электрона невелика, становится необходимым учесть движение атомных электронов за время пролёта, искажаемое полем рассеиваемого электрона, а также обменное взаимодействие этого электрона с атомными.

• Подобным образом определяются **формфакторы ядер и элементарных частиц**, описывающие их внутреннюю структуру. 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 отсчёта 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  $Q^2$  и квадрат полной энергии сталкивающихся частиц в системе их центра масс  $s$

$$Q^2 = (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 - (E - E')^2/c^2, \quad s = (E_e + E_A)^2 - (\mathbf{p}_e + \mathbf{p}_A)^2 c^2. \quad (18.27)$$

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  $Q^2 \gg (m_e c)^2$  даёт после азимутального усреднения для дифференциального сечения упругого рассеяния электрона на нуклоне (протоне или нейтроне, с массой  $M_N$ )

$$d\sigma = \frac{4\pi\alpha^2\hbar^2 M_N^2 c^6 dQ^2}{(s - M_N^2 c^4)^2 (Q^2)^2} \Phi,$$

$$\Phi = \frac{(2s/c^2 - Q^2 - 2M_N^2 c^2)^2}{4M_N^2 c^2 + Q^2} \left( G_E^2(Q^2) + \frac{Q^2 G_M^2(Q^2)}{4M_N^2 c^2} \right) +$$

$$+ Q^2 \left( \frac{Q^2 G_M^2(Q^2)}{4M_N^2 c^2} - G_E^2(Q^2) \right).$$

Эксперимент показал, что с хорошей 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. (11.6))

$$G_E^p = \frac{1}{(1+v)^2}, \quad G_M^p(q^2) = \frac{g_p}{(1+v)^2}, \quad \left( \begin{array}{l} v = \frac{Q^2}{(\mu c)^2}, \\ \mu \approx 770 \text{ MeV}/c^2 \end{array} \right). \quad (18.28)$$

$$G_E^n = \frac{v}{(1+v)^2}, \quad G_M^n(q^2) = \frac{g_n}{(1+v)^2}$$

Входящая в эти формулы величина  $\mu$  близка к массе  $\rho$ -мезона. 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,

$$\rho_E^p \propto \rho_M^p \propto \rho_M^n \propto e^{-\mu r/\hbar}, \quad \rho_E^n \propto [1 + \hbar/(\mu r)] e^{-\mu r/\hbar}.$$

Для тяжёлых ядер характерный масштаб убывания формфактора с ростом импульса передачи составляет 60 – 70 МэВ/с, что отвечает размеру в десятков ферми.

◇ Введённое выше понятие формфактора определялось для первого приближения Борновской теории возмущений. Разумеется, это понятие полезно использовать и при расчётах более высокого порядка, однако в этих приближениях в формфактор собираются уже не все эффекты структуры.

### 18.3.6. 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 § 5.3. Гамильтониан системы записывается в виде суммы  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ , где  $\hat{H}_0$  — невозмущённый гамильтониан с известными решениями, отличающийся от оператора кинетической энергии  $\hat{p}^2/2m$ , а  $\hat{V}$  — возмущение, исчезающее на больших расстояниях. В этом случае взамен плоской волны (18.2) начальное состояние выбирается как собственное состояние невозмущённого гамильтониана  $\hat{H}_0$ , а соответствующее интегральное уравнение взамен (18.3) имеет сходный вид, но с функцией Грина оператора  $\hat{H}_0$ . Такой подход иногда называют *методом искажённых волн* (подробнее см. например в [3]).

## § 18.4. Рассеяние при больших энергиях. Приближение эйконала

При большой энергии налетающей частицы  $E = \hbar^2 k^2 / 2m \gg |\bar{U}|$ ,  $ka \gg 1$  рассеяние происходит в основном на малый угол, как в классической механике или в оптике (дифракция). В таких процессах переданный импульс  $\hbar q = |\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}')|$  мал так, что  $q \ll k$ , величина переданного импульса связана с углом рассеяния  $\theta$  простым соотношением  $q = 2k \sin \theta / 2 \approx k\theta$ , с хорошей точностью можно считать, что вектор  $\mathbf{q}$  перпендикулярен вектору импульса  $\hbar \mathbf{k}$ .

Если при этом выполняется второе условие (18.21), то ситуация описывается Борновским приближением. Если же характерное значение потенциала сравнивается с  $\hbar v/a$  или превышает эту величину, необходим новый анализ.

Рассматриваемая задача имеет выделенное направление. Поэтому удобно разделить пространственные координаты на продольные ( $z$ ) и поперечные ( $\boldsymbol{\rho}$ ) так, что  $\mathbf{r} \equiv (x, y, z) \equiv (\boldsymbol{\rho}, z)$ . Мы будем ещё использовать единичный вектор, направленный вдоль импульса падающей частицы  $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$  так, что  $\mathbf{r} = \boldsymbol{\rho} + \mathbf{n}z$ .

Рассеяние на малый угол означает, что первоначальное движение частицы в значительной мере сохраняется. Поэтому естественно искать волновую функцию в виде произведения быстро меняющейся в

пространстве экспоненты  $e^{ikz}$  и сравнительно медленно меняющейся функции  $\phi(\mathbf{r})$ :

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz}\phi(\mathbf{r}), \quad (\phi(\mathbf{r})|_{z \rightarrow -\infty} = 1). \quad (18.29)$$

Подстановка в уравнение Шредингера даёт

$$\frac{ik\hbar^2}{m} \cdot \frac{\partial\phi}{\partial z} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta\phi = V\phi. \quad (18.30)$$

Только первое слагаемое слева содержит большой коэффициент  $k$ . Поэтому вкладами вторых производных можно пренебречь. С учётом этого наше уравнение упрощается и легко решается

$$\frac{ik\hbar^2}{m} \cdot \frac{\partial\phi}{\partial z} = V\phi \Rightarrow \phi(\boldsymbol{\rho}, z) = \exp \left[ -\frac{im}{k\hbar^2} \int_{-\infty}^z V(\boldsymbol{\rho}, z') dz' \right].$$

Подставляя этот ответ в выражение для амплитуды (18.17), получаем

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi i \hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} V(\mathbf{r}) \exp \left[ -\frac{im}{k\hbar^2} \int_{-\infty}^z V(\boldsymbol{\rho} + \mathbf{n}z') dz' \right] d^2\boldsymbol{\rho} dz.$$

Выполняя теперь интегрирование по  $z$ , получаем, что амплитуда рассеяния зависит только от импульса передачи  $q$ , как и в первом Борновском приближении:

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{ik}{2\pi} \int d^2\boldsymbol{\rho} e^{i\mathbf{q}\boldsymbol{\rho}} \left( 1 - e^{i\chi(\boldsymbol{\rho})} \right), \quad \chi(\boldsymbol{\rho}) = \frac{-m}{k\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} V(\boldsymbol{\rho} + \mathbf{n}z) dz. \quad (18.31)$$

По аналогии с классической механикой и оптикой естественно называть вектор  $\boldsymbol{\rho}$  прицельным параметром, а величину  $\chi(\boldsymbol{\rho})$  — *эйконалом*. Само же соотношение (18.31) называют *представлением эйконала*.

Поскольку потенциал имеет заметную величину только при  $\rho < a$ , амплитуда не мала только при  $qa < 1$ . Поскольку  $q \approx k\theta$ , это означает, что рассеявшиеся частицы летят в основном внутрь узкого конуса  $\theta < 1/(ka)$ .

◇ Подобным образом можно получить представление эйконала, включающее такие неупругие процессы, что энергии их возбуждения значительно меньше  $E$ .

## § 18.5. Разложение по парциальным волнам

При не очень больших энергиях можно отказаться от использования идей теории возмущений и использовать разложение амплитуды по сферическим гармоникам. Как мы увидим, пока энергии не велики, в соответствующем ряду достаточно удерживать только несколько первых членов.

### 18.5.1. Фазы рассеяния и парциальные амплитуды

В § 9.2 были найдены решения уравнения Шредингера для состояний с определёнными значениями энергии и момента импульса и асимптотики этих решений — произведения асимптотик радиальных волновых функций  $R_{k\ell}^{s,c}(r)$  (9.10) на сферические гармоники  $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ . В частности, плоская волна является решением уравнения Шредингера с равным нулю потенциалом. Её разложение по сферическим гармоникам содержит только «синусные решения»  $R_{k\ell}^s(r)$ , т. е. в асимптотике вида (9.12) для каждого  $\ell$  имеем  $\delta_\ell = 0$ :

$$e^{ikz} = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{\ell=0}^{\infty} (i)^\ell (2\ell+1) P_\ell(\cos\theta) R_{k\ell}^s(r). \quad (18.32a)$$

Подставляя сюда асимптотику (9.11b), найдём известное в литературе асимптотическое выражение

$$e^{ikz} \stackrel{(r \rightarrow \infty)}{\Rightarrow} \sum \frac{2\ell+1}{2ikr} P_\ell(\cos\theta) [e^{ikr} - (-1)^\ell e^{-ikr}]. \quad (18.32b)$$

Подскажем, что суммирование в последнем выражении распространяется только на значения  $\ell \lesssim kr$ . С ростом  $r$  эффективный верхний предел суммирования растёт, а вклады слагаемых с большими  $\ell$  малы, и суммируются в экспоненциально малые величины. (Это следует из детального анализа асимптотик (9.11).) Предельное же выражение (18.32b) указывает только правило соответствия для асимптотического ряда, стоящего справа, и буквально понимаемое выражение в правой части не всегда существует (например, при  $\theta = 0, \pi$ ).

В изучаемом случае потенциала со сферической симметрией волновая функция зависит лишь от  $r$  и  $\theta$ , но не от  $\varphi$ . Поэтому разложение общего решения по сферическим гармоникам (9.3) содержит лишь

$Y_{\ell 0}(\theta, \varphi) \propto P_{\ell}(\cos \theta)$ . Вместе с (18.2), (9.12) это означает, что на больших расстояниях от рассеивателя

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= e^{ikz} + f(E, \theta) \cdot e^{ikr}/r = \\ &= \sum i^{-\ell} (2\ell + 1) A_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) \frac{\sin(kr - \ell\pi/2 + \delta_{\ell})}{kr}, \end{aligned} \quad (18.33)$$

где множитель  $i^{-\ell}(2\ell+1)/k$  введён для удобства последующих вычислений, и  $A_{\ell}$  — коэффициент, определяемый видом потенциала. При этом в точном разложении плоской волны (18.32) коэффициенты<sup>1</sup>  $A_{\ell} = 1$ .

Рассмотрим разность между полной волновой функцией (18.33) и выражением для плоской волны (18.32), 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 (18.33) эта разность представляет собой только расходящуюся волну  $f(E, \theta)e^{ikr}/r$ . Поэтому коэффициент при сходящейся 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

$$f(E, \theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \sum \frac{2\ell+1}{2ikr} P_{\ell}(\cos \theta) (e^{2i\delta_{\ell}} - 1) e^{ikr}.$$

Таким образом, разложение для амплитуды рассеяния принимает вид

$$\begin{aligned} f(E, \theta) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) f_{\ell}(E) P_{\ell}(\cos \theta); \\ f_{\ell}(E) &= \frac{e^{2i\delta_{\ell}} - 1}{2ik} \equiv e^{i\delta_{\ell}} \frac{\sin \delta_{\ell}}{k} \equiv \frac{S_{\ell} - 1}{2ik} \equiv \\ &\equiv \frac{1}{2} \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta P_{\ell}(\cos \theta) f(E, \theta). \end{aligned} \quad (18.34)$$

<sup>1</sup>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]).

Величины  $f_\ell(E)$  называются **парциальными амплитудами**. Последнее выражение даёт способ вычисления парциальных амплитуд по известной полной амплитуде рассеяния  $f(\theta)$ . Мы ввели здесь также удобную для некоторых обсуждений величину  $S_\ell$  — отношение амплитуд расходящейся и сходящейся волн в полном решении (18.33) (с точностью до коэффициента  $(-1)^{\ell+1}$ ).

В соответствии с (18.34) и (B.16), полное сечение упругого рассеяния  $\sigma_{el} \equiv \sigma$  складывается из **парциальных сечений**  $\sigma_\ell$ :

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega = \sum_{\ell=0} \sigma_\ell, \quad \sigma_\ell = 4\pi(2\ell+1)|f_\ell|^2 \equiv 4\pi(2\ell+1) \frac{\sin^2 \delta_\ell}{k^2}. \quad (18.35)$$

Подобным же образом определяются и парциальные сечения для разных каналов неупругого рассеяния (см. § 18.8). Как мы увидим ниже, в итоге удаётся записать оптическую теорему для каждой парциальной волны по отдельности (18.46).

Полезно заметить ещё, что в силу (18.34) для упругого рассеяния имеет место соотношение  $\text{Im} f_\ell = k|f_\ell|^2$ . Его можно переписать в виде  $\text{Im}(1/f_\ell) = -k$ . Эта запись означает, что парциальную амплитуду можно выразить через некоторую *действительную* функцию  $g_\ell$  в виде

$$f_\ell = \frac{1}{g_\ell - ik}. \quad (18.36)$$

Такое представление полезно при некоторых анализах.

◇ Проиллюстрируем введённые понятия в классической механике для рассеяния на твёрдом шаре радиуса  $R$ . Здесь момент импульса  $\hbar\ell = p\rho = \hbar k\rho$ , где  $\rho$  — прицельный параметр. Прицельный параметр, отвечающий данному значению  $\ell$ , есть  $\rho_\ell = \ell/k$ . Парциальное сечение  $\sigma_{\ell(\text{кл})}$  определяется как площадь кольца между окружностями радиусов  $\rho_\ell$  и  $\rho_{\ell+1}$ , т. е. классическое парциальное сечение:

$$\sigma_{\ell(\text{кл})} = \pi(\rho_{\ell+1}^2 - \rho_\ell^2) = \frac{\pi(2\ell+1)}{k^2} \quad (\ell \leq kR). \quad (18.37)$$

Результаты экспериментов по угловому распределению рассеянных частиц позволяют найти отдельные парциальные сечения и относительные фазы амплитуд. Так, если в рассеянии представлены только  $s$ - и  $p$ -волны ( $\ell = 0$  и  $\ell = 1$ ), то сечение имеет вид  $d\sigma = [|f_0|^2 + 6\text{Re}(f_0^* f_1) \cos \theta + 9|f_1|^2 \cos^2 \theta] d\Omega$ .

◇ Полученное разложение особенно удобно для описания рассеяния медленных частиц, когда фактически работает только несколько первых гармоник (см. подробнее ниже, разд. 18.5.2). Область применимости такого описания часто простирается до довольно больших энергий. Это разложение оказывается также полезным при описании резонансов в рассеянии (разд. 18.5.3).

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 её 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.

◇ В задаче об одномерном движении мы обнаружили связь между полюсами амплитуды рассеяния и энергиями связанных состояний (2.34). В трёхмерном случае эта связь формулируется в виде общей теоремы.

*Вне положительной полусоси особенности парциальной амплитуды на физическом листе — только полюса при  $E < 0$ . Положения этих полюсов отвечают энергиям связанных состояний с данным значением момента импульса  $\ell$ .*

◇ 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  $\Gamma_i$  эти полюса отвечают резонансам в рассеянии, см. подробнее в разд. 18.5.3. При этом  $M_i$  — масса резонанса,  $\Gamma_i$  — его ширина,  $\ell$  — его спин. (На других языках эти резонансы называют квазисвязанными состояниями, виртуальными уровнями, квазиуровнями, § 2.8 и т. п.)

### 18.5.2. 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:

$$\delta_\ell \propto k^{2\ell+1} \Rightarrow f_\ell \propto k^{2\ell}. \quad (18.38a)$$

Напомним, что фаза рассеяния безразмерна. Единственный размерный фактор, присутствующий в задаче помимо  $k$ , — характерный размер поля  $a$ . Поэтому выписанные оценки уточняются следующим образом:

$$\delta_\ell \propto (ka)^{2\ell+1} \Rightarrow f_\ell \propto a(ka)^{2\ell}. \quad (18.38b)$$

Чтобы получить эти оценки в случае, когда применимо ещё и борновское приближение<sup>1</sup>, подставим в (18.34) формулу (18.19b), где разложим  $\sin qr$  в ряд, и воспользуемся тождеством  $q^2 = 2k^2(1 - \cos \theta)$ . Обозначив  $\cos \theta = z$ , получаем

$$f_\ell(k) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty r^2 dr V(r) \int_{-1}^1 dz P_\ell(z) \sum_k \frac{(-2k^2 r^2 (1-z))^n}{(2n+1)!}. \quad (18.39)$$

Функции  $P_\ell(z)$  — полиномы (Лежандра) по  $z$  степени  $\ell$ , ортогональные друг другу на отрезке  $(-1, 1)$ . Иными словами, функция  $P_\ell(z)$  ортогональна любому полиному степени, меньшей чем  $\ell$ . Следовательно, вклад в  $f_\ell$  дают только те слагаемые ряда, номер которых  $n \geq \ell$ . При  $k \rightarrow 0$  это означает, что  $f_\ell \propto k^{2\ell}$  (18.38a).

Такое вычисление даёт правильный ответ, если интеграл (18.39) сходится для всех  $n$ . Это справедливо для ядерных сил, убывающих на больших расстояниях по закону  $e^{-(r/a)}/r$ . Межатомные и межмолекулярные силы убывают обычно медленнее — по степенному закону  $V \sim 1/r^\gamma$ . Для таких потенциалов зависимость (18.38a) имеет место только при  $\ell < (\gamma - 3)/2$ . Для фаз с  $\ell > (\gamma - 3)/2$  оценка того же интеграла даёт зависимость  $\delta_\ell \propto k^{\gamma-2}$ .

Итак, при низких энергиях  $f_\ell \propto k^{2\ell}$ . В частности, при этом основной вклад даёт  $s$ -волна, для которой  $\delta_0 = -ak$ ,  $f_0 = -a$ . Величина  $a$  называется *длиной рассеяния*. При этом в соответствии со сказанным в начале раздела

$$d\sigma = a^2 d\Omega, \quad \sigma = 4\pi a^2. \quad (18.40)$$

<sup>1</sup>Общий случай требует лишь небольших уточнений.

### 18.5.3. Резонансное рассеяние

Выясним теперь, как проявляются в рассеянии квазистационарные состояния, подобные изучавшимся в разд. 2.8. Рассмотрим для этого амплитуду как функцию энергии частицы  $E$  в комплексной плоскости энергии.

Перепишем  $R_{k\ell}(r) \sim \sin(kr - \pi\ell/2 + \delta_\ell)/r$  в виде

$$R_{k\ell}(r) \rightarrow \frac{C}{r} [a_\ell(E)e^{ikr} + a_\ell^*(E)e^{-ikr}], \quad a_\ell(E) = -ie^{i(\delta_\ell - \pi\ell/2)}.$$

При этом в соответствии с (18.34) парциальная амплитуда есть

$$f_\ell(E) = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_\ell} - 1) = \frac{1}{2ik} \left[ \frac{a_\ell(E)}{a_\ell^*(E)} (-1)^\ell - 1 \right]. \quad (18.41)$$

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 волну<sup>1</sup>, т. е. должно быть  $a_\ell^*(E_0) = 0$ . В соответствии с этим 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):

$$f_\ell(E) = \frac{1}{2ik} \left[ e^{2i\delta_{\ell 0}} \frac{E - E_r - i\Gamma/2}{E - E_r + i\Gamma/2} - 1 \right] \quad \left( e^{2i\delta_{\ell 0}} = (-1)^\ell \frac{\beta_\ell}{\beta_\ell^*} \right). \quad (18.42)$$

При этом  $\delta_\ell = \delta_{\ell 0} - \arctg[\Gamma/2(E - E_r)]$ , где  $\delta_{\ell 0}$  — фаза рассеяния вдали от резонанса. При прохождении через резонанс фаза рассеяния изме-

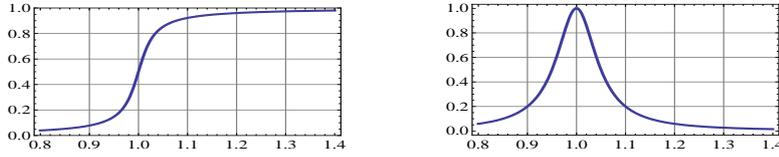


Рис. 14. Слева: зависимость фазы от  $E$  вблизи резонанса; справа: зависимость парциального сечения  $\sigma_\ell$  от  $E$  вблизи резонанса (случай  $|\delta_{\ell 0}| \ll 1$ ).

<sup>1</sup>Такое условие использовалось в § 2.8 для определения ширины квазиуровня  $\Gamma$ .

няется на  $\pi$ . Обычно фаза  $\delta_{\ell 0}$  невелика. В этом случае парциальное сечение имеет резонансную зависимость от энергии, с «куполom» при  $E = E_r$  (правый рис. 14), и

$$\sigma_{\ell} = \frac{\pi}{k^2} \frac{(2\ell + 1)\Gamma^2}{(E - E_r)^2 + \Gamma^2/4}. \quad (18.43a)$$

Наличие даже постоянной, но не очень маленькой нерезонансной фазы сдвигает положение максимума и меняет его форму. Если, в частности,  $\delta_{\ell 0} = \pi/2$ , зависимость сечения от энергии имеет совсем другой вид, с двумя максимумами и нулём при  $E = E_r$ :

$$\sigma_{\ell} = \frac{4\pi}{k^2} \frac{(2\ell + 1)(E - E_r)^2}{(E - E_r)^2 + \Gamma^2/4}. \quad (18.43b)$$

Поэтому наблюдение пика в сечении при некоторой энергии  $E_p$  говорит только о том, что резонанс *скорее всего* есть, и его положение  $E_r$  близко к  $E_p$ , утверждать же, что  $E_r = E_p$ , нельзя. 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  $\beta_{\ell}$ , вернёмся к нестационарной задаче, изучавшейся в § 2.8. 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  $\Gamma/\hbar$ . Отсюда  $|\beta_{\ell}|^2 = 1/(\hbar v\Gamma)$ .

◇ Соотношение (18.42) представляет собой ясную иллюстрацию общего утверждения на стр. 406 о том, что резонансам в рассеянии отвечают полюса в нижней полуплоскости комплексной энергии.

## § 18.6. Особенности рассеяния частиц со спином

- При рассеянии спиновых частиц все амплитуды и сечения зависят ещё и от спинов. Обычным приёмом является изучение рассеяния при различных значениях спинов каждой из частиц в начальном и конечном состояниях.

Если взаимодействие сохраняет суммарный спин частиц (например, не зависит от спина или зависит от скалярного произведения спи-

нов), полезно разложить начальное состояние по состояниям с различными значениями полного спина и вычислить по отдельности амплитуды рассеяния в каждом случае.

Нередко оказывается достаточным изучить зависимость только от спина сталкивающихся частиц и усреднить по конечным спиновым состояниям. В этом случае, например, для описания первого Борновского приближения удобно обозначить через  $|i\rangle$  и  $|f\rangle$  начальное и конечное спиновые состояния и через  $n_f$  — кратность возможных конечных спиновых состояний, обычно  $n_f = (2s_1 + 1)(2s_2 + 1)$ . Выписывая только спиновые усреднения, имеем

$$\begin{aligned} d\sigma &\propto \frac{1}{n_f} \sum_f |\langle i| \int d^3\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} |f\rangle \langle f| \int d^3\mathbf{r}' V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}'} |i\rangle| \equiv \\ &\equiv \frac{1}{n_f} \langle i| \int d^3\mathbf{r} V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \int d^3\mathbf{r}' V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}'} |i\rangle. \end{aligned}$$

• При рассеянии тождественных частиц результат зависит от суммарного спина начального состояния. Фактически здесь проявляется обменное взаимодействие. Пространственная волновая функция относительного движения симметрична относительно перестановки частиц ( $\theta \leftrightarrow \pi - \theta$ ), если суммарный спин системы чётный, пространственная волновая функция относительного движения антисимметрична относительно перестановки частиц, если суммарный спин системы нечётный (13.7). Это означает, в частности, что в состояниях с чётным суммарным спином амплитуда рассеяния содержит лишь чётные парциальные волны, а в состояниях с нечётным суммарным спином амплитуда рассеяния содержит лишь нечётные парциальные волны.

Так, 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.  $f(\pi - \theta) = f(\theta)$ . Например, для «игрушечного» потенциала  $V = f(\mathbf{s}_1 \mathbf{s}_2) \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  в состоянии с полным спином 1 амплитуда рассеяния равна нулю, а в состоянии с полным спином 0 это — легко вычисляемая константа.

• При рассеянии строго вперёд или назад проекция полного орбитального момента на импульс равна нулю, и сохранение момента импульса означает, что сохраняется проекция суммарного спина на им-

пульс (суммарная спиральность, равная *разности* спиральностей сталкивающихся или разлетающихся частиц). Так, для рассеяния электрона на протоне (спины  $1/2$ ) эти проекции  $\lambda_e$  и  $\lambda_p$  могут быть равны  $\pm 1/2$  ( $\pm$ ) и суммарная спиральность есть  $\lambda \equiv \lambda_e - \lambda_p$ . Для рассеяния вперёд отличны от нуля только амплитуды

$$f_{(+,+)\rightarrow(+,+)} \equiv f_{(-,-)\rightarrow(-,-)}, \quad f_{(+,+)\rightarrow(-,-)} \equiv f_{(-,-)\rightarrow(+,+)} \quad (\lambda = 0),$$

$$f_{(+,-)\rightarrow(+,-)} \equiv f_{(-,+)\rightarrow(-,+)} \quad (\lambda = \pm 1).$$

Равенства между амплитудами с противоположными спиральностями следуют из сохранения чётности. Наличие переходов  $(+, +) \rightarrow (-, -)$  означает, что для рассеяния вперёд 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*).

## § 18.7. Некоторые особенности рассеяния заряженных частиц

На больших расстояниях взаимодействие пары заряженных частиц друг с другом остаётся чисто кулоновским, это поле недостаточно быстро убывает с расстоянием, и асимптотическое условие (18.2) для рассеяния в этом случае записать невозможно. Прямое решение уравнения Шредингера даёт для этой задачи взамен (9.12) совсем другую асимптотику. В этом случае сходящаяся волна появляется не только из падающей волны, но и из рассеянной. В итоге взамен (18.2) при  $r \rightarrow \infty$  следует писать вычисленное в [1] решение для волновой функции и

амплитуды рассеяния (здесь  $a_{B,Z} = \hbar^2/(mZe^2)$  )

$$\psi = \left[ 1 - \frac{i}{a_{B,Z}^2 k^2(\mathbf{qr})} \right] e^{i[kz + \ln(\mathbf{qr})/(ka_{B,Z})]} + \frac{f(\theta)}{r} e^{i(kr - \ln(\mathbf{qr})/(ka_{B,Z}))},$$

$$f(\theta) = -\frac{1}{2k^2 a_{B,Z} \sin^2(\theta/2)} \cdot \frac{\Gamma(1 + i/(ka_{B,Z}))}{\Gamma(1 - i/(ka_{B,Z}))}. \quad (18.44a)$$

Получающееся отсюда выражение для сечения совпадает с результатом борновского приближения (18.25). Сильному изменению подверглась в сравнении с этим приближением фаза амплитуды рассеяния и фаза волновой функции.

Соответствующее выражение для парциальной волны имеет вид

$$R_{k\ell} \approx \frac{2}{r} \sin \left( kr + \frac{1}{ka_B} \ln(kr) - \frac{\pi}{2} \ell + \delta_{\ell c} \right), \quad (18.44b)$$

$$\delta_{\ell c} = \arg \Gamma(\ell + 1 - i/k).$$

Важной новой чертой (18.44) является появление медленно меняющейся величины  $\ln(kr)$  в показателе экспоненты или под аргументом синуса («кулоновская фаза»).

Ситуация меняется в условиях, когда наряду с электростатическими действуют другие, короткодействующие силы, вклад которых при очень малых углах рассеяния пренебрежимо мал по сравнению с кулоновским. Грубо говоря, 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 (18.27) близка к квадрату обратного радиуса действия ядерных сил  $(\hbar/a)^2 \approx (m_\pi c)^2$ .

## § 18.8. Рассеяние при наличии неупругости

Простое обобщение соотношений (18.34) позволяет описывать и те случаи, когда в результате соударения помимо «повёрнутых» состояний исходных частиц появляются новые состояния или частицы — при

наличии неупругости (примеры — рассеяние света на атоме с его переходом в возбуждённое состояние, рассеяние с вылетом электрона — фотоэффект, рассеяние протона на протоне с вылетом  $\pi$ -мезона).

### 18.8.1. Общие соотношения. Канал упругого рассеяния

При низких энергиях модификацию упругого рассеяния и основные характеристики неупругого рассеяния можно описать, вводя комплексные значения фаз рассеяния  $\delta_\ell$ . 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,

$$J_{\text{in}} = -\frac{\pi \hbar k}{m} \sum (2\ell + 1); \quad J_{\text{out}} = \frac{\pi \hbar k}{m} \sum (2\ell + 1) |S_\ell|^2.$$

Неупругое сечение — разность этих интегралов, делённая на падающий поток  $j_{\text{inc}}$ . Сечение упругого рассеяния определялось в (18.35). Полное сечение  $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{in}}$ . В итоге

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{el}} &= \sum \sigma_{\ell(\text{el})}, \quad \sigma_{\ell(\text{el})} = \pi (2\ell + 1) (|1 - S_\ell|^2) / k^2; \\ \sigma_{\ell(\text{in})} &= \pi (2\ell + 1) (1 - |S_\ell|^2) / k^2; \\ \sigma_{\text{tot}} &= \sum \sigma_{\ell(\text{tot})}, \quad \sigma_{\ell(\text{tot})} = 2\pi (2\ell + 1) (1 - \text{Re} S_\ell) / k^2. \end{aligned} \quad (18.45)$$

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, все фазы действительны, и мы приходим к (18.35).

◇ Соотношения (18.34), (18.45) позволяют вычислить и мнимую часть парциальной амплитуды  $\text{Im} f_\ell(k) = (1 - \text{Re} S_\ell) / 2k$ . Сравнение с (18.45) показывает, что оптическая теорема (18.12) выполняется для каждой парциальной волны по отдельности:

$$(2\ell + 1) \text{Im} f_\ell(k) = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\ell(\text{tot})}(k). \quad (18.46)$$

### 18.8.2. Неупругие процессы

Для описания отдельных неупругих каналов рассеяния общий формализм, развитый выше, не проходит. Конечно, можно вычислять амплитуду рассеяния для каждого отдельного канала, и, например, первому Борновскому приближению отвечает вычисление амплитуды как матричного элемента перехода между начальным и избранным конечным состоянием. Но как учесть разнообразие конечных состояний?

Здесь на помощь приходит золотое правило Ферми (16.29). Скорость переходов из начального состояния в конечное пропорциональна плотности числа конечных состояний по энергии, которая определяется из закона сохранения энергии. Сечение же процесса пропорционально этой скорости, делённой на величину падающего потока частиц  $\hbar k/m$ . В свою очередь плотность числа конечных состояний электрона при его фиксированной энергии пропорциональна  $k$ . Именно поэтому для упругого рассеяния множитель  $k$  из ответа выпадает, из этой плотности в ответе осталось только интегрирование по углам (18.5).

Сечение неупругого процесса  $i \rightarrow f$  определяется как скорость процесса, делённая на поток падающих частиц,

$$\sigma_{f(i)} = m \int |F_{fi}|^2 \frac{\text{Pd}^3 \mathbf{k}_f}{k_i} \delta(E_f - E_i). \quad (18.47)$$

(Мы распорядились нормировкой так, чтобы включить в матричный элемент все возникшие множители).

При небольших энергиях падающей частицы интересны три важных случая.

1. Конечное состояние кинематически не отличимо от начального, пример — реакция  $\pi^- p \rightarrow \pi^0 n$  в пренебрежении различием масс  $\pi^-$  и  $\pi^0$ ,  $p$  и  $n$ . В этом случае сечение процесса при малых энергиях стремится к конечному пределу, в точности как и для упругого рассеяния — (18.40).

2. Конечное состояние может рождаться, только если энергия падающей частицы больше некоторого «порогового» значения  $E_t$  (примеры — рассеяние электрона на атоме, сопровождающееся его переходом в возбуждённое состояние, рассеяние протона на протоне с рождением пиона, . . .) В этом случае повторение предыдущего рассуждения для упругого рассеяния показывает, что для двухчастичного конечного со-

стояния при небольших значениях  $E - E_t$  сечение пропорционально импульсу рождённой частицы<sup>1</sup>  $k_p$ , т. е.  $\sigma_i \propto k_p \propto \sqrt{E - E_t}$ .

3. Конечное состояние нестабильно и может спонтанно распасться на другие частицы. Один из примеров — рассеяние электрона на атоме, находящемся в возбуждённом состоянии. Другой пример хорошо известен в истории проблемы атомной бомбы. Медленные (тепловые) нейтроны хорошо поглощаются ядрами  $^{235}\text{U}$ , получающееся возбуждённое ядро испытывает быстрый спонтанный распад на ядра середины периодической таблицы элементов с выделением большого количества энергии (ядерная энергия — см. обсуждение на стр. 342). В этом случае при уменьшении энергии падающей частицы плотность конечных состояний стремится к конечному пределу, отвечающему спонтанному распаду, а поток падающих частиц стремится к нулю пропорционально скорости. Это означает, что при уменьшении энергии сечение рассматриваемого процесса растёт как  $\sigma_i \propto 1/v$ , при этом число ядерных распадов в единицу времени  $n\sigma_i v$  ( $n$  — плотность числа нейтронов) практически не зависит от их скорости. (Поглощение быстрых нейтронов приводит обычно к образованию сравнительно долго живущих трансурановых элементов, которые можно использовать отдельно, но с точки зрения немедленного энерговыделения эти нейтроны пропадают. Поэтому в урановом ядерном реакторе для увеличения числа актов деления нейтроны замедляют, заставляя их пройти через слой тяжёлой воды или графита.) Подобная ситуация ( $\sigma v \approx \text{const}$ ) возникает и при изучении некоторых процессов с частицами, которые могли бы составлять тёмную материю.

### 18.8.3. 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  $\rho$  (значение  $\rho = 1$  отвечает чёрному шару, при  $\rho = 0$  рассеиватель незаметен). Эта задача очень похожа на задачу о дифракции плоской волны на сером (полупрозрачном) шаре.

При  $ka \gg 1$  разумный результат даёт квазиклассическое прибли-

<sup>1</sup>Здесь фактически предполагается, что в неупругом процессе рождается система с моментом  $\ell = 0$ . При  $\ell \neq 0$  в пороговую зависимость добавляется дополнительный множитель  $k_p^{2\ell} \propto (E - E_t)^\ell$ .

жение. Момент импульса частицы, движущейся с прицельным параметром  $\rho$ , есть  $L = p\rho \equiv \hbar k\rho$ . Поэтому значения момента, участвующие в соударениях,  $\ell \lesssim \ell_0 = ka$ . 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  $\rho$ ), а отношение амплитуд расходящейся и сходящейся волн в полном решении составляет  $S_\ell = 1 - \rho$  (ср. определение (18.34)). (Для полного поглощения — чёрный шар —  $S_\ell = 0$ .) Область  $\ell \approx \ell_0$  не даёт большого вклада в сечение. Итак, в соответствии с (18.34) мы получаем в хорошем приближении чисто мнимую амплитуду упругого рассеяния

$$f(k, \theta) = \frac{i}{2k} \rho \sum_{\ell=0}^{\ell_0} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta). \quad (18.48)$$

Найдём сначала полное и упругое сечения. Для этого выпишем мнимую часть амплитуды (упругого) рассеяния вперёд с помощью (B.15):

$$\text{Im} f(k, 0) = \frac{1}{2k} \rho \sum_{\ell=0}^{\ell_0} (2\ell + 1) = \frac{1}{2k} \rho \ell_0^2 \approx \frac{\rho}{2} ka^2.$$

Использование оптической теоремы (18.12) даёт теперь полное сечение

$$\sigma_{\text{tot}} = 2\pi \rho a^2, \quad (18.49)$$

Результат имеет правильный порядок величины  $\pi a^2$ , но как появился множитель  $2\rho$  (для чёрного шара это был бы не очень понятный множитель 2)? Чтобы понять это, воспользуемся соотношениями (18.45). Они дают

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\ell_0} \rho^2 (2\ell + 1) = \frac{\pi \ell_0^2 \rho^2}{k^2} = \pi \rho^2 a^2 \Rightarrow \frac{\sigma_{el}}{\sigma_{\text{tot}}} = \frac{\rho}{2}. \quad (18.50)$$

Точно так же получается и сечение неупругого рассеяния  $\sigma_{\text{in}} = \pi(2\rho - \rho^2)a^2$ . Итак, в нашей модели упругое сечение значительно меньше неупругого, и только для чёрного шара упругое и неупругое сечения равны. (Чтобы получить в такой модели относительно небольшую неупругость, надо использовать комплексные  $S_\ell$ .)

Чтобы описать угловое распределение упругого рассеяния, при больших  $\ell$  заменим в (18.48) суммирование интегрированием (В.17). Тогда получается

$$f(k, \theta) \approx \frac{i}{k} \rho \int_0^{\ell_0} \ell J_0(\ell\theta) d\ell = \rho \frac{ia}{\theta} J_1(ka\theta).$$

Поэтому (ср. (В.19)) сечение упругого рассеяния велико лишь в области малых углов  $\theta \lesssim (1/ka)$ :

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = |f|^2 \approx \rho^2 a^2 \begin{cases} (ka)^2/4 & \text{при } \theta \ll 1/ka, \\ \frac{2 \sin^2(ka - \pi/4)}{\pi ka\theta^2} & \text{при } \theta \gg 1/ka. \end{cases}$$

Полученная картина при  $\rho = 1$  (чёрный шар) неплохо описывает, например, рассеяние нейтронов с  $E = 100$  МэВ на тяжёлом ядре радиуса  $a \sim 10^{-12}$  см, при этом  $ka \sim 10$ . Эта картина даёт грубое описание и для рассеяния адронов (протонов, нейтронов, антипротонов) друг на друге при больших энергиях (в сотни и тысячи ГэВ), с  $\rho \approx 0,4$  и  $a \sim 0,6$  Фм, эти столкновения преимущественно неупругие.

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  $a \sim \theta^{-1} \sim 10^{27}$  см (размер видимой Вселенной).

## § 18.9. Ограничения подхода

Обсудим теперь некоторые ограничения развитых выше подходов к изучению реальных физических задач.

- Иногда сама концепция потенциала требует уточнения. Простейший пример — рассеяние электрона на атоме (изучавшееся в разд. 18.3.5). При более точном подходе, помимо детализации структуры рассеивателя, т. е. отдельного учёта полей, создаваемых ядром и отдельными электронами, и учёта возможного возбуждения электронных состояний в атоме, необходимо учитывать обменное взаимодействие рассеивающегося электрона с электронами атома. Последнюю поправку невозможно свести к простой модификации потенциала.

- При переходе к релятивистским задачам становится существенным *запаздывание* (как запаздывающие потенциалы в электродинамике). В таких задачах следует учитывать зависимость взаимодействия от времени, что не описывается каким-нибудь простым потенциалом. При описании столкновений элементарных частиц концепция потенциала чаще всего не работает, здесь оказывается важным рождение и поглощение частиц в промежуточных состояниях. Для этих задач разработаны другие подходы.

- До сих пор 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  $\Delta p$ . 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 серьёзным 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  $\Delta p$ . При этом в конечном состоянии невозможно различить электрон, испытавший рассеяние, которое обусловило 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).

- Бесконечный радиус действия кулоновских сил (нулевая масса фотона) приводят к трудностям в постановке и решении задач с участием заряженных частиц. Уже при получении формулы Резерфорда (разд. 18.3.4) для того, чтобы избежать появления расходящихся выражений на промежуточных этапах вычисления, мы заменили кулоновское поле более быстро убывающим полем  $1/r \rightarrow e^{-\mu r}/r$  со вспомогательным параметром  $\mu$  ( $\mu = m_\gamma c/\hbar$ , где  $m_\gamma$  — масса фотона), и устремили  $\mu$  к нулю (*регуляризация*).

Рассмотрим в качестве примера Комптон-эффект ( $\gamma e \rightarrow e\gamma$ ) и вычисление его сечения с помощью Борновской теории возмущений. В этой задаче ряд теории возмущений есть разложение по постоянной тонкой структуры  $\alpha$ . В первом исчезающем приближении этой теории получается простое конечное выражение для амплитуды Комп-

тоновского рассеяния и сечения  $f = \alpha f_1$ ,  $d\sigma^{(1)} = A|f_1|^2$  (при низких частотах это — формула Томсона, известная из курса ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ,  $A$  — коэффициент).

При вычислении первой поправки по  $\alpha$  к этому сечению два обстоятельства создают большие трудности. Во-первых, поправка к сечению  $d\sigma^{(1)}$  расходится. Во-вторых, на опыте энергия и импульс фотона измеряются с некоторой конечной погрешностью  $\varepsilon$ , и не существует способа отличить состояния электрона с 4-импульсом  $(E, \mathbf{p}c)$  от состояния *электрон + фотон* с 4-импульсом электрона  $(E' + \omega, \mathbf{p}'c + \mathbf{k})$  при  $\mathbf{k} = \omega$ , если  $E'$  и  $E$ ,  $\mathbf{p}$  и  $\mathbf{p}'$  достаточно близки, и энергия фотона  $\omega < \varepsilon$  (если бы фотон имел конечную массу  $m_\gamma$ , достаточно было бы иметь  $\varepsilon < m_\gamma c^2$ ). Поэтому **наблюдаемой величиной** является не сечение простого Комpton-эффекта, а сечение Комpton-эффекта с возможным дополнительным излучением любого числа мягких сопутствующих фотонов, чья суммарная энергия меньше  $\varepsilon$ . В получившемся суммарном сечении «страшные» эффекты компенсируют друг друга. Спасение пришло в *изменении постановки задачи рассеяния*.

Если ввести, как раньше, малую конечную массу фотона  $\mu$ , вычисление поправки порядка  $\alpha$  к амплитуде и сечению Комpton-эффекта даёт  $f = \alpha f_1 + \alpha^2(f_2 + g \ln \mu)$ ,  $d\sigma = A\alpha^2|f_1|^2 + 2A\alpha^3 \text{Re}[f_1^*(f_2 + g \ln \mu)]$ . При  $\mu \rightarrow 0$  поправка оказывается расходящейся и к тому же отрицательной (*инфракрасная катастрофа*)! В том же порядке по  $\alpha$  сечение двукратного Комpton-эффекта ( $e + \gamma \rightarrow e + \gamma + \gamma$ ) с излучением дополнительного «мягкого» фотона с энергией, меньшей малой величины  $\varepsilon$  расходится так, что  $d\sigma_{s2} = A\alpha^3 [f_3 + \text{Re}(f_1^* g) \ln(\varepsilon/\mu)]$ . Сумма же обоих этих вкладов уже не содержит  $\mu$ , т.е. переход к пределу  $\mu \rightarrow 0$  стал законным. Эта сумма даёт конечное сечение **наблюдаемого** процесса рассеяния с испусканием дополнительного «мягкого» фотона. Цена вопроса — появление в ответе зависимости от погрешности определения энергии  $\Delta\varepsilon$ .

## § 18.10. Задачи

- Получить в борновском приближении дифференциальное сечение рассеяния и указать критерий применимости для потенциалов
  - $V = (g/r)e^{-\mu r}$  (Юкава); б)  $V = A r e^{-br}$ ;
  - $V = \begin{cases} -U & \text{при } |r| < a, \\ 0 & \text{при } |r| > a \end{cases}$  (прямоугольная яма).

2. Вычислить сечение упругого рассеяния быстрых электронов атомом водорода в основном состоянии.
3. Быстрый электрон упруго рассеивается протоном, находящимся в основном состоянии в поле  $U = m\omega^2 r^2/2$ . Вычислить дифференциальное сечение.
4. Для сферической потенциальной ямы (барьера) с радиусом  $R$  найти сечение рассеяния
  - а) в борновском приближении;
  - б) для медленных частиц (включая и резонансное рассеяние — ср. [7], задача 13.35).
5. 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.
6. 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.
11. Показать, что в условиях применимости Борновского приближения (18.21), формула эйконала (18.31) даёт амплитуду, удовлетворяющую оптической теореме (18.12), действительная часть которой отвечает первому Борновскому приближению.

## Приложение А

# Квантовая механика на компьютере

### § А.1. Постановка задачи

В программе `quantx` [19] многие физические ситуации моделируются для одномерного кусочно-постоянного потенциала вида рис. 1, и это моделирование осуществляется по немного видоизменённому варианту схемы, изложенной в конце § 2.5 с примерами в §§ 2.6, 2.7. При подходящем числе делений таким способом можно аппроксимировать любой потенциал. В программе `сшивки` осуществляются слева направо. Поэтому в задаче о связанных состояниях можно вычислять коэффициент при растущей направо асимптотике правее области действия сил  $V(E)$ , и для определения уровней решать уравнение  $B(E) = 0$ .

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

$$-\frac{d^2 \tilde{\psi}(\tilde{x})}{d\tilde{x}^2} + \tilde{U}(x)\tilde{\psi}(\tilde{x}) = \tilde{E}\tilde{\psi}(\tilde{x}), \quad \int |\tilde{\psi}(\tilde{x})|^2 d\tilde{x} = 1. \quad (\text{A.1})$$

В последующем тексте этого приложения значки тильда опускаются.

### Общие указания к выполнению работ

Предлагаемые упражнения следует рассматривать как численный эксперимент и отнести к этой работе и её результатам так же, как к нормальному лабораторному эксперименту. Основная часть работы состоит в выполнении программы действий, приведённой ниже. Эта

программа действий специально составлена так, чтобы оставить у студента свободу выбора параметров и характера описания получающихся результатов. Эффект выполнения работы и понимание основ квантовой механики будут усилены, если после её выполнения Вы обсудите результаты с коллегами, решавшими те же задачи для других значений параметров. С этой целью рекомендуется вести детальный протокол наблюдений (как в лабораторном эксперименте), зарисовывая основные черты наблюдаемой картины и записывая параметры, отвечающие наиболее интересным, на Ваш взгляд, явлениям. В перечне *задач для решения с помощью программы quantx* [19] читатель найдёт множество проблем, дополняющих набор, приводимый ниже. Эти задачи не входят в минимальный корпус задач квантовой механики, но понимание соответствующих вопросов создаёт хорошее дополнение для углублённого понимания курса и последующей исследовательской работы. Программа и её простые модификации удобна и для решения множество других проблем, позволяя обнаружить новые явления в физике твёрдого тела, оптике, теории строения молекул и т. п. В большинстве случаев после обнаружения этих явлений их удаётся понять и без компьютерного моделирования, но трудно заранее догадаться об их существовании.

Указания по использованию программы для решения тех или иных частных задач находятся в *инструкции по управлению* [19].

*Параметры ям можно менять в очень широких пределах, но для некоторых их значений используемая точность вычислений недостаточна. Это может привести к внешне бессмысленным результатам. Поняв происхождение этих «ошибок», пользователь получит новое, более глубокое понимание.*

## Задания

### § А.2. Свободное движение. Волновой пакет

Цель упражнений — пронаблюдать переход от монохроматической волны к волновому пакету и наглядно рассмотреть основные характеристики волнового пакета.

Сформируйте пакет в интервале энергий  $(E_h, E_\ell)$  из равноотстоящих по энергии  $E_j$  состояний  $\Psi(x, t) = \sum \beta_j \cdot \Psi_j(x) e^{-iE_j t}$  (в программе вес гармоник  $\beta_j$  автоматически задан гауссовской функцией по  $E_j$ ). Далее рассмотрите поведение  $|\psi(x)|^2$ ,  $\text{Re } \psi(x)$  в зависимости от времени

для одной гармоники и для целого пакета. Рассмотрите расплывание пакета, проследите различие между фазовой и групповой скоростью.

Убедитесь, что при конечном числе гармоник пакет периодичен во времени, при увеличении числа гармоник, представляющих тот же пакет, период повторения пакета увеличивается, т. е. эта периодичность — артефакт использования дискретного преобразования Фурье вместо непрерывного.

### § А.3. Простая яма или барьер и пара ям

Цели упражнений — увидеть:

- как возникают уровни дискретного спектра (как появляются собственные значения);
- связь между положениями уровней и пиками коэффициента прохождения;
- что основные явления лишь слабо зависят от формы ямы или барьера в достаточно широких пределах изменения этой формы;
- рассмотреть основные свойства спектра состояний простейшей системы — прямоугольной потенциальной ямы и рассеяния на ней и на аналогичном потенциальном барьере при различных значениях её параметров;
- изучить особенности мелкой или  $\delta$ -видной ямы;
- рассмотреть расплывание пакета над областью потенциала;
- познакомиться с понятием квазистационарного состояния.

В соответствии с этим предлагается выполнить следующий набор упражнений (*о распределении по импульсам — факультативно*).

1. Рассмотреть потенциальную яму глубиной  $U_a$  при ширине ямы  $a$ . Рассмотреть поведение волновой функции при возрастании  $E$  от дна ямы до нуля.

(i) Найти уровни энергии  $E_n$ , волновые функции. Что можно сказать об их симметрии и о числе нулей  $\psi(x)$ ? Что именно определяет ширину и положение максимумов в распределении по импульсам?

(ii) Проследить за изменением положения уровней при увеличении ширины и (или) глубины ямы. Убедиться, что число уровней и вид волновых функций (с точностью до нормировки) не меняются при таком изменении  $U_0$  и  $a$ , что  $U_0 a^2 = \text{const}$ . Убедиться, что при этом

значения  $E_n a^2$  не меняются. Как зависит число уровней в яме  $N$  от величины  $U_0 a^2$ ?

(iii) Сравнить расстояния уровней от дна ямы с уровнями бесконечно глубокой ямы. При каких значениях номера уровня  $n$  приближение бесконечно глубокой ямы работает с погрешностью меньше 10 % для разных значений  $N$ ?

(iv) Сравнить узкую ( $\delta$ -видную) и мелкую ямы. Сравните разброс координат частицы с размером ямы.

(v) Проследить за изменением волновой функции верхнего состояния при изменении величины  $U_0 a^2$  в окрестности тех значений, когда число уровней меняется на 1. Как выглядит волновая функция в импульсном представлении  $\psi(k)$  для этих состояний.

(vi) Как зависит коэффициент прохождения от энергии при  $E \leq 2|U_0|$ .

2. Рассмотрите яму из нескольких ступенек (по Вашему выбору) и меняйте её глубину при сохранении формы. Пронаблюдайте за изменением положения уровней и видом волновых функций. Что нового Вы увидели по сравнению со случаем прямоугольной ямы.
3. Расположим на расстоянии  $b$  пару одинаковых ям, каждая из которых по-одиночке имела не менее трёх уровней. Найдите энергии связанных состояний и их волновые функции в этой паре ям. Сравните эти энергии и волновые функции с энергиями и волновыми функциями одиночной ямы. *Рассмотрите квадраты волновых функций в импульсном представлении  $|\psi(k)|^2$ .* Как меняются эти уровни и волновые функции при изменении  $b$ .
4. Повторите предыдущее исследование в случае, когда одна из ям немного отличается от другой (например, немного глубже или немного уже). Вы обнаружите, что при большом расстоянии между ямами состояния локализованы в каждой из них по отдельности, а при сближении ям они обобществляются так, что небольшие различия между ямами становятся несущественными. Объясните это наблюдение (см. разд. 2.6.3, F.3).
5. Возьмите две разных ямы так, что например, 2-й уровень уединённой первой ямы имеет примерно ту же энергию, что первый уровень уединённой второй ямы. Рассмотрите уровни и волновые функции этой пары ям в зависимости от расстояния между ними.

6. Сравнить зависимость коэффициента прохождения  $T(E)$  над ямой глубиной  $U_a$  и горбом высотой  $U_a$  одинаковой ширины  $a$  от энергии от  $E = 0$ , меняя максимальное значение энергии  $E$ . Изучить изменение этой зависимости при изменении  $a$ .  
Просмотреть зависимость  $|\psi_E(x)|^2$  внутри и вне ямы для значений энергии  $E$ , отвечающих максимумам и минимумам коэффициента прохождения.
7. (i) Рассмотреть зависимость от энергии коэффициента прохождения  $T(E)$  над парой одинаковых ям и барьеров при изменении расстояния  $b$  между ними. Сопоставить с положением резонансов и уровней в не очень глубокой яме.  
(ii) 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 дублируется. Рассмотреть особенности зависимости  $T(E)$  для этого набора параметров и близких к нему параметров.
8. Специально рассмотреть случай очень узких и высоких барьеров (например,  $U = 100$ ,  $a = 0,01$ ). Просмотреть зависимость  $|\psi_E(x)|^2$  при изменении энергии  $E$  в окрестности точек, отвечающих максимумам и минимумам коэффициента прохождения — внутри и вне ямы. Увеличение амплитуды внутри ямы при некоторых энергиях отвечает появлению квазиуровней.  
Найдите положения  $E_r$  и ширины  $\Gamma_r$  нескольких квазиуровней для этого потенциала.
9. Рассмотреть прохождение над ямой или горбом следующих волновых пакетов:  
(i) Пакет с центром в максимуме коэффициента прохождения с шириной, задаваемой ближайшими минимумами. В частности, пакет с центром, отвечающим энергии квазиуровня  $E_r$  и шириной  $\Gamma_r$ .  
(ii) Пакет, охватывающий 2–3 квазиуровня.  
(iii) Пакет с центром в минимуме коэффициента прохождения.

## § А.4. Набор ям. Периодическое поле

Цели первой серии упражнений:

- рассмотреть появление энергетических зон при переходе от отдельной ямы или барьера к набору повторяющихся ям или барьеров;

- рассмотреть эффекты примесей, неточного воспроизведения ям в кристаллах, влияние границ кристалла на уровни.

В случае периодического поля повторяющаяся ячейка строится из прямоугольных ям и барьеров. Для каждой энергии слева задаётся 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 (2.14а) 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 (7.1),  $A' = e^{iqa} A$ ,  $B' = e^{iqa} B$  ( $a$  — параметр решётки). Получающиеся соотношения составляют уравнение для определения квазиимпульса  $q$  при заданной энергии  $E$  (или зависимости  $E$  от  $q$ ). Для значений энергии, принадлежащих запрещённой зоне, это уравнение не имеет действительного решения.

Цели второй серии упражнений — понять, как возникают энергетические зоны в периодическом поле, как выглядит зависимость энергии от квазиимпульса для разных зон, разобраться, как происходит переход от конечного большого числа ям к бесконечной решётке.

Для этого предлагается выполнить следующий набор упражнений.

### Конечная решётка с большим числом ячеек

1. Рассмотрите сначала одну уединённую яму глубиной  $-U_0$  и шириной  $b$  с числом уровней не меньше 4, затем расположим на расстоянии  $a$  от неё ещё 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 — зон (для верхнего уровня число дочерних уровней может оказаться меньше — *выталкивание уровней*). Убедитесь, что с увеличением  $a$  число вытолкнутых уровней уменьшается. Как меняется при этом расстояние между уровнями в каждой группе? Что происходит с группами уровней при уменьшении  $a$ ?

Рассмотреть зависимость ширины зоны  $\Delta E_k$  от  $k$ ,  $n$  и  $a$ . Построить зависимости  $\ln \Delta E_k$  от  $a$ . Объяснить результат.

Рассмотрите те же задачи для случая, когда тиражируется яма другой формы («стул»).

- Для  $n = 8$  сделайте третью яму чуть глубже или мельче или чуть уже. Обнаружьте локализацию некоторых состояний на этой яме.
2. Рассмотрите зависимость от энергии коэффициента прохождения над указанными выше системами. Рассмотреть ту же зависимость для системы барьеров высотой  $U_0$  с теми же ширинами и расстояниями между барьерами.

Убедиться в том, что при росте числа ям или барьеров появляются энергетические интервалы практически полной прозрачности и непрозрачности со все более резкими границами (прообразы разрешённых и запрещённых зон в кристалле). Дать численную характеристику изменения глубины и ширины получившихся зон с ростом числа ям или барьеров.

Описать особенности поведения волновых функций в разных областях пространства для энергий, принадлежащих каждой из этих зон. Как изменится картина при наличии «примеси», о которой говорилось в первом задании?

Найдите какие-нибудь наборы параметров, отвечающие случаям с выталкиванием уровней. Покажите, что в этом случае существуют области прозрачности при низких энергиях.

### Периодическая решётка

*В последующих задачах по возможности используйте те же элементарные ямы, что и в предыдущих. Просмотрите зависимость энергии от квазиимпульса для разных зон. Пронаблюдайте, как меняется эффективная масса электрона при изменении  $a$ .*

*Опишите вид  $\operatorname{Re} \psi(x)$ ,  $\operatorname{Im} \psi(x)$ ,  $|\psi(x)|^2$  для значений энергии, соответствующих дну зоны и её «потолку», чуть выше и чуть ниже — для разных зон.*

*Просмотрите то же самое в трёхмерном изображении, где на осях отложены  $x$ ,  $\operatorname{Re} \psi(x)$  и  $\operatorname{Im} \psi(x)$ . Пронаблюдайте изменение картины при непрерывном изменении энергии в интервале, включающем и запрещённую зону.*

3. Взять за основу уединённую яму с двумя или тремя уровнями. Составить периодическую решётку из таких ям с периодом решётки  $a$ . Рассмотреть систему разрешённых и запрещённых зон в такой решётке при различных значениях  $a$ . Обнаружить значение  $a$ , при котором число разрешённых зон с отрицательной энергией равно числу

уровней в «материнской» яме. Как меняются ширины разрешённых и запрещённых зон при изменении  $a$ ? Сравнить с результатом для конечной решётки.

Пронаблюдать зависимость ширины запрещённой зоны от энергии при больших положительных энергиях.

4. Взять за элемент периодичности пару ям существенно разной глубины и (или) ширины. Составить периодическую решётку из таких ям с периодом решётки  $a$ . Рассмотреть систему разрешённых и запрещённых зон в такой решётке при различных значениях  $a$ . Обнаружить значение  $a$ , при котором число разрешённых зон с отрицательной энергией равно числу уровней в «материнской» яме. Как меняются ширины разрешённых и запрещённых зон при изменении  $a$ ? Сравнить с результатом для конечной решётки.

Пронаблюдать зависимость ширины запрещённой зоны от энергии при больших положительных энергиях.

5. Рассмотрите зависимость энергии от квазиимпульса  $E(q)$  в случае слабого периодического поля — когда для «материнской» ямы  $U_0 a^2 \sim 1 \div 0,1$  и  $b \sim a$ . Убедитесь, что в этом случае кривая  $E(q)$  представляет собой куски параболы  $E(q) = (\pi n/a + q)^2$  с малыми разрывами. Интересен вид квадрата модуля волновой функции вблизи разрывов — на границах разрешённых зон.

6. Взять за элемент периодичности уединённую яму с двумя или тремя уровнями. Составить периодическую решётку из таких ям с периодом решётки  $a$ . Рассмотреть систему разрешённых и запрещённых зон в такой решётке при различных значениях  $a$ . Рассмотрите эту же решётку, взяв за элемент периодичности 5, 6 или 7 ям из этой решётки. Сами зоны при этом, естественно, не изменятся. Как изменится при этом вид зависимости  $E(q)$ ?

Для последнего случая «испортите» элемент периодичности, сделав, например, третью яму немного глубже или шире. Как изменится при этом зонная структура? Рассмотрите  $|\psi(x)|^2$  для разных зон.

## § А.5. Движение в центральном поле

В программе QUANTS центрально-симметричный потенциал аппроксимируют последовательностью ступенек (по радиусу). В каждой из них решение имеет вид (9.10) с соответствующим  $k = \sqrt{2m(E - U_i)}/\hbar$ ,

действительным или мнимым. Правила сшивки 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 получаться либо экспоненциально убывающее решение (дискретный спектр), либо решение в форме (9.12) (непрерывный спектр). Прямое применение этой схемы сложнее, чем для простого одномерного движения, поскольку аналитические выражения для решений (9.10) при больших  $\ell$  оказываются очень громоздкими суммами взаимно компенсирующих друг друга слагаемых. Поэтому приходится использовать модификацию указанной схемы, уменьшающую эти трудности. При  $E < 0$  условие исчезновения растущей экспоненты даёт уровни энергии, при  $E > 0$  из решения получаются фазы рассеяния. Задача моделирования — понять особенности трёхмерной задачи в сравнении с одномерной.

Ответы можно представлять для частного значения  $\ell$  или для всех значений  $\ell$ , меньших некоторого. По умолчанию рассматривается второй вариант с максимально высокой верхней границей по  $\ell$ .

В соответствии с этим предлагается выполнить следующий набор упражнений.

1. Определите уровни энергии в прямоугольной (по радиусу) потенциальной яме. Рассмотрите радиальные волновые функции для отдельных состояний.
2. Рассмотрите частицу в узком сферическом «слое». Изучите аналогию с вращательными уровнями молекулы.
3. Рассмотрите трёхмерный гармонический осциллятор в приближении суммы ступенек. Определите чётность и кратности вырождения уровней. Рассмотрите погрешность приближения ступеньками.
4. Рассмотрите кулоновскую задачу в приближении суммы ступенек. Определите чётность и кратности вырождения уровней. Рассмотрите погрешность приближения ступеньками.
5. Для потенциала, представляющего собой твёрдый шарик радиусом  $a$ , построить волновые функции и найти фазы рассеяния в зависимости от энергии для  $\ell = 0, 1, 2$ .
6. Повторить ту же задачу для потенциала, представляющего собой тонкий сферический слой глубины  $U$  с радиусами границ  $a$  и  $a + b$ .

## Приложение В

### Математические дополнения

#### § В.1. $\delta$ -функция, $\theta$ -функция

**Определение.** Как известно,  $\delta$ -функция — не обычная функция, а *обобщённая функция*. Она обращается в нуль при  $x \neq 0$  и не определена при  $x = 0$ .  $\delta$ -функция задаётся на пространстве обычных гладких функций  $g(x)$  правилом свёртки с любой из функций  $g(x)$ ,

$$\int_a^b g(x) \delta(x) dx = \begin{cases} g(0) & \text{при } a < 0 < b, \\ 0 & \text{при } a, b > 0 \text{ или } a, b < 0. \end{cases} \quad (\text{В.1})$$

(Это соотношение определяет и размерность  $\delta$ -функции —  $[\ell]^{-1}$ ).

Во многих задачах  $\delta$ -функция возникает как предел последовательности обычных функций, например,

$$\begin{aligned} \delta_1(x) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \left( \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} \right) \equiv \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \left( \frac{L}{x^2 L^2 + 1} \right), \\ \delta_2(x) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\pi} \varepsilon} e^{-x^2/\varepsilon^2} \equiv \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{L}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2 L^2}, \\ \delta_3(x) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \left( \frac{\sin^2 xt}{\pi x^2 t} \right). \end{aligned} \quad (\text{В.2})$$

Все эти представления описывают одну и ту же  $\delta$ -функцию, определённую равенством (В.1).

∇ Для функции  $\delta_1(x)$  это видно из цепочки равенств

$$\begin{aligned} \int_{-a}^b g(x) \delta_1(x) dx &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \int_{-a}^b \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} g(x) dx = \\ & \stackrel{x=y\varepsilon}{=} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \int_{-a/\varepsilon}^{b/\varepsilon} \frac{1}{y^2 + 1} g(y\varepsilon) dy = g(0) \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{y^2 + 1} dy = g(0). \end{aligned}$$

Случай конечного  $\varepsilon \ll 1$  отвечает описанию неустойчивой частицы (2.46), а предел  $\varepsilon \rightarrow 0$  описывает переход к случаю, когда эффекты неустойчивости не важны, и частицу можно считать стабильной.

▽ Подобную процедуру можно провести и для функции  $\delta_2(x)$ .

▽ Чтобы проверить тот факт, что и  $\delta_3(x)$  представляет  $\delta$ -функцию, обозначим  $f(x, t) = \frac{\sin^2 xt}{\pi x^2 t}$ . Заметим, что

$$f(x, t) \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{если } x \neq 0 \\ t/\pi & \text{если } x \rightarrow 0 \end{cases} \text{ при } t \rightarrow \infty.$$

Кроме того,

$$\begin{aligned} & \lim_{t \rightarrow \infty} \left\{ \int_{-\delta}^{\delta} f(x, t) \phi(x) dx \equiv \int_{-\delta}^{\delta} \frac{\sin^2 xt}{\pi x^2 t} \phi(x) dx \right\} = \\ & = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \int_{-\delta t}^{\delta t} \frac{\sin^2 y}{y^2} \phi(y/t) dy \rightarrow \phi(0) \boxed{\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 y}{y^2} dy} \rightarrow \phi(0). \end{aligned} \quad (\text{В.3})$$

Интеграл в рамке, несомненно, сходится. Это — число. Коэффициент у этого выражения подобран так, что оно равно 1. Таким образом, функция  $\delta_3(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} f(x, t)$  обладает всеми свойствами обычной  $\delta$ -функции. Это представление используется при получении золотого правила Ферми, стр. 363.

**Квадрат  $\delta$ -функции.** Нередко при вычислениях появляются выражения, содержащие квадрат  $\delta$ -функции. (В частности, вопрос о смысле такого объекта обсуждался фактически при изучении нормировки собственных функций операторов координаты и импульса на стр. 26.) Формальное применение определений даёт в этом случае бесконечное, расходящееся выражение.

Смысл этим выражениям можно придать, вернувшись к определению  $\delta$ -функции как предела последовательности обычных функций. Здесь удобно использовать вторые формы выражений (В.2), определённые через размер системы  $L$ . Самый простой путь получения ответа состоит в использовании выражения  $\delta_2(x)$ . Запишем квадрат этого

выражения до предельного перехода, определив величину  $L' = L\sqrt{2}$

$$\left(\frac{L}{\sqrt{\pi}}e^{-L^2x^2}\right)^2 \equiv \frac{L^2}{\pi}e^{-2L^2x^2} \equiv \frac{L}{\sqrt{2\pi}} \cdot \frac{L'}{\sqrt{\pi}}e^{-L'^2x^2}.$$

Применение предельного перехода  $L' \rightarrow \infty$  даёт теперь соответствие  $\delta_2^2(x) \rightsquigarrow \frac{L}{\sqrt{2\pi}} \cdot \delta_2(x)$ . Этот результат не зависит от вида используемого предельного перехода. Для зависимости от времени именно такое соответствие изучалось для функции  $\delta_3(x)$  и при обсуждении в разд. 16.6.2.

*Квадрат  $\delta$ -функции определяется как произведение этой  $\delta$ -функции на макроскопический размер системы, делённый на  $\sqrt{2\pi}$ ,*

$$\delta^2(x) \rightsquigarrow \frac{L}{\sqrt{2\pi}} \cdot \delta(x). \quad (\text{B.4})$$

#### **$\delta$ -функция от сложного аргумента.**

Пусть  $f(x) = 0$  при  $x = x_0$ . Тогда

$$\delta[f(x)] = \frac{1}{|f'(x_0)|} \delta(x - x_0). \quad (\text{B.5a})$$

Чтобы убедиться в этом, 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 (B.5):

$$I = \int \varphi\left(x_0 + \frac{y}{f'(x_0)}\right) \cdot \frac{\delta(y)}{f'(x_0)} dy = \frac{\varphi(x_0)}{|f'(x_0)|}.$$

Если  $f(x)$  обращается в ноль не в одной точке,  $f(x = x_i) = 0$ , то (B.5) очевидным образом модифицируется:

$$\delta[f(x)] = \sum_i \frac{1}{|f'(x_i)|} \delta(x - x_i). \quad (\text{B.5b})$$

**Производная  $\delta$ -функции.** В вычислениях иногда появляется производная  $\delta$ -функции,  $\delta'(x)$ . По общим правилам, эта производная определяется с помощью интегрирования по частям ( $a < 0 < b$ ):

$$\int_a^b \delta'(x)g(x)dx = \delta(x)g(x)|_a^b - \int \delta(x)g'(x)dx = -g'(0). \quad (\text{B.6})$$

**$\theta$ -функция и  $\varepsilon$ -функция.** В дополнение к  $\delta$ -функции определяют также две схожие ступенчатые функции

$$\theta(x) = \int_{-\infty}^x \delta(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0, \\ 1 & \text{при } x > 0, \end{cases} \quad (\text{В.7a})$$

$$\varepsilon(x) \equiv \text{sign}(x) = \begin{cases} -1 & \text{при } x < 0, \\ 1 & \text{при } x > 0 \end{cases} = \theta(x) - \theta(-x). \quad (\text{В.7b})$$

Очевидно, что

$$d\theta(x)/dx = \delta(x), \quad d|x|/dx = \varepsilon(x). \quad (\text{В.7c})$$

**Для трёхмерного случая  $\delta$ -функцию** естественно определить соотношением

$$\int \delta(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = f(0). \quad (\text{В.8a})$$

Это означает, в частности, что в прямоугольных координатах

$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z). \quad (\text{В.8b})$$

Таким образом, размерность функции  $\delta(\mathbf{r})$  есть  $[\ell]^{-3}$ . Уже из этого ясно, что функция  $\delta(\mathbf{r})$  не может совпадать с  $\delta$ -функцией от радиуса  $\delta(r)$ , хотя на первый взгляд эти  $\delta$ -функции имеют одинаковый смысл. Чтобы установить соответствие между этими функциями, найдём с помощью уравнения Пуассона плотность распределения заряда, отвечающую распределению потенциала

$$\phi(\mathbf{r}) = q/r.$$

Начнём с не совсем аккуратного, но «естественного» вычисления. Очевидно, что распределение заряда  $\rho(r)$ , 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 даёт  $\Phi = r^2(-q/r^2) = -q$ . Дифференцирование константы даёт нуль. 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 даёт 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

$$\delta(\mathbf{r}) = -\frac{\delta'(r)}{4\pi r}. \quad (\text{В.9})$$

Проверьте, что такое выражение удовлетворяет определению (В.8).

## § В.2. Г-функция. Некоторые интегралы и ряды

• **Г-функцией** называют интеграл

$$\Gamma(p) = \int_0^{\infty} x^{p-1} e^{-x} dx. \quad (\text{В.10})$$

Полезные для нас свойства Г-функции:

$$\begin{aligned} \Gamma(p+1) &= p\Gamma(p), & \Gamma(n+1) &= n! \quad (n - \text{целое}), \\ \Gamma(1/2) &= \sqrt{\pi}, & \int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-x^2} dx &= \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right). \end{aligned} \quad (\text{В.11})$$

При  $x \gg 1$  имеем формулу (Стирлинга)

$$\Gamma(x+1) = \sqrt{2\pi x} \left(\frac{x}{e}\right)^x. \quad (\text{В.12})$$

• При малых значениях  $x$  имеют место разложения в ряды:

$$(1+x)^a = 1 + ax + \frac{a(a-1)}{2!}x^2 + \dots; \quad (\text{В.13})$$

$$\tanh x = x - \frac{x^3}{3} + \dots; \quad \coth x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{20} + \dots$$

• Для суммирования хорошо сходящихся рядов иногда удобно использовать формулу Эйлера–Маклорена

$$\sum_{j=0}^{\infty} f(j) = \int_0^{\infty} f(j) dj + \frac{f(0)}{2} - \frac{f'(0)}{12} + \frac{f''(0)}{720} - \dots \quad (\text{В.14})$$

### § В.3. Свойства некоторых специальных функций

$$P_k(-x) = (-1)^k P_k(x), \quad P_k(1) = 1, \quad (\text{В.15})$$

$$\frac{2\ell+1}{2} \int_0^{\pi} P_{\ell}(\cos \theta) P_m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \delta_{\ell m}. \quad (\text{В.16})$$

$$P_k(\cos \theta) \rightarrow J_0(k\theta) \quad \text{при } k \rightarrow \infty. \quad (\text{В.17})$$

$$\int_0^a x J_0(x) dx = a J_1(a), \quad (\text{В.18})$$

$$J_n(x) \Rightarrow \begin{cases} (x/2)^n & \text{при } x \rightarrow 0; \\ \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi n}{2} - \frac{\pi}{4}\right) & \text{при } x \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (\text{В.19})$$

• Пусть  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$  — трёхмерные векторы,  $r_i = \sqrt{\mathbf{r}_i^2}$  — их длины, а  $\theta$  — угол между ними ( $\cos \theta = (\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) / (r_1 r_2)$ ). Величина  $1/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$  является

производящей функций полиномов Лежандра. Это означает, что имеет место разложение в ряд

$$\frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \begin{cases} \frac{1}{r_1} \left(\frac{r_2}{r_1}\right)^{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) & \text{при } r_1 > r_2; \\ \frac{1}{r_2} \left(\frac{r_1}{r_2}\right)^{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) & \text{при } r_2 > r_1. \end{cases} \quad (\text{B.20})$$

• Радиальные функции атома водорода  $R_{n,\ell}(r)$  выражаются через вспомогательные полиномы  $w_{n,\ell}(r)$ , вычисляемые с помощью рекуррентных соотношений (9.16) (при нормировке использованы соотношения (B.10), (B.11)). В атомных единицах

$$R_{n,\ell} \equiv e^{-r/n} \Phi_{n\ell} \left(\frac{r}{n}\right) = \frac{2}{n^2} \frac{1}{\sqrt{(n+\ell)!}} \left(\frac{2r}{n}\right)^{\ell} e^{-r/n} \cdot w_{n,\ell} \left(\frac{r}{n}\right),$$

$$w_{n,n-1}(x) = 1, \quad w_{n,n-2}(x) = 2(n-1) \left(1 - \frac{x}{n-1}\right), \quad (\text{B.21})$$

$$w_{n,n-3}(x) = \sqrt{(2n-3)(2n-4)} \left(1 - \frac{2x}{n-2} + \frac{2x^2}{(n-2)(2n-3)}\right).$$

В частности,

$$\begin{aligned} \Phi_{10} &= 2, & \Phi_{20} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1-x), & \Phi_{21} &= \frac{x}{\sqrt{6}}, \\ \Phi_{30} &= \frac{2}{3\sqrt{3}} \left(1 - 2x + \frac{2}{3}x^2\right), & \Phi_{31} &= \frac{8x}{9\sqrt{6}} \left(1 - \frac{x}{2}\right), & \Phi_{32} &= \frac{4x^2}{9\sqrt{30}}. \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

#### § В.4. Средние значения $\langle r^k \rangle_{n\ell}$ для атома водорода

В силу теоремы о вириале (2.7), для атома водорода средние значения кинетической и потенциальной энергии связаны соотношением  $2\langle T \rangle = -\langle U \rangle$ . Поэтому

$$\left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right\rangle_n = \left\langle \frac{e^2}{2r} \right\rangle_n = \frac{\text{Ry}}{n^2}. \quad (\text{B.23a})$$

Отсюда для среднего значения величины  $1/r$  и среднеквадратичного значения скорости электрона  $v_n$  получается при любых значениях  $\ell$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_n = \frac{1}{a_B n^2}, \quad \langle v \rangle_n = c \frac{\alpha}{n}. \quad (\text{В.23b})$$

*Дальнейшие результаты приложения — в атомных единицах.*

Чтобы вычислить среднее значение величины  $1/r^2$ , вспомним выражение для эффективного потенциала (9.4a). Если добавить сюда слагаемое  $\hbar^2 \delta / (2mr^2)$  с малым коэффициентом  $\delta \ll 1$ , это отвечает переходу от целого  $\ell$  к нецелой величине  $\ell' \approx \ell + \delta / (2\ell + 1)$ . Воспользуемся теперь правилом дифференцирования энергии по параметру (5.9), которое даёт (только при малых  $\delta$ )  $\left\langle \frac{\hbar^2 \delta}{2mr^2} \right\rangle = \frac{\delta}{2\ell + 1} \frac{\partial E_{n,\ell}}{\partial \ell}$ . Вспоминая ответ (9.19) с  $n = n_r + \ell + 1$ , найдём в атомных единицах

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{n,\ell} = \frac{2}{n^3(2\ell + 1)}. \quad (\text{В.23c})$$

• Вычислим теперь среднее (по собственным состояниям атома водорода) значение любой степени радиуса

$$\langle r^k \rangle_{n\ell} \equiv \int |R_{n\ell m}|^2 r^k r^2 dr. \quad (\text{В.24a})$$

Для отрицательных  $k$  интеграл (В.24a) может расходиться при малых  $r$ . Асимптотическое поведение (9.7) показывает, что для сходимости интеграла необходимо

$$k + 2\ell + 3 > 0. \quad (\text{В.24b})$$

Запишем уравнение (9.15) с заменой  $\varkappa = 1/n$  в виде  $\hat{F} R_{n\ell} = 0$  и рассмотрим интеграл

$$\int_0^\infty \left( r^{k+1} R'_{n\ell} - \frac{k-1}{2} r^k R_{n\ell} \right) \hat{F} R_{n\ell} r^2 dr = 0.$$

Интегрирование по частям в правой части оставляет только средние значения степеней  $r$ , давая рекуррентное соотношение Крамера

$$-\frac{k+1}{n^2} \langle r^k \rangle + (2k+1) \langle r^{k-1} \rangle + k \left[ \frac{k^2-1}{4} - \ell(\ell+1) \right] \langle r^{k-2} \rangle = 0. \quad (\text{В.25})$$

Используя найденные выше средние  $\langle r^k \rangle$  с  $k = -1$  и  $-2$  из (В.23) и  $\langle r^0 \rangle = 1$  (условие нормировки), можно определить теперь средние для любого  $k$ . В частности,

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \frac{3n^2 - \ell(\ell + 1)}{2}, \\ (\Delta r)^2 \equiv \langle r^2 \rangle - \langle r \rangle^2 &= \frac{n^4 + 2n^2 - \ell^2(\ell + 1)^2}{4}, \\ \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle &= \frac{1}{n^3(\ell + 1/2)\ell(\ell + 1)} \quad (\ell \neq 0). \end{aligned} \quad (\text{В.26})$$

### § В.5. Оператор $e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}}$ . Проекционные операторы

• Чтобы вычислить оператор  $e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}}$ , полезно рассмотреть вспомогательный оператор  $\hat{B}(\eta) = e^{\eta\hat{A}}\hat{B}e^{-\eta\hat{A}}$  и найти для него дифференциальное уравнение. В итоге получается

$$e^{\hat{A}}\hat{B}e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad (\text{В.27})$$

В случае  $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$  имеем

$$e^{\eta(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\eta\hat{A}}e^{\eta\hat{B}}e^{-\eta^2[\hat{A}, \hat{B}]/2}. \quad (\text{В.28})$$

• В § 1.5 введено понятие проекционного оператора как оператора, осуществляющего проектирование произвольного вектора состояния  $|a\rangle$  на состояние  $|f_i\rangle$ ,

$$\hat{\mathcal{P}}_i \stackrel{\text{def}}{=} |f_i\rangle\langle f_i| \quad (\text{В.29})$$

(без суммирования по значениям  $i$ ) (1.14). Важнейшие свойства (и признаки) проекционного оператора легко усматриваются из определения.

(а) Квадрат проекционного оператора  $\hat{\mathcal{P}}_i^2$  совпадает с  $\hat{\mathcal{P}}_i$  (1.15).

(б) Сумма проекционных операторов на пару ортогональных состояний есть тоже оператор проектирования на «плоскость», образованную этими двумя состояниями.

$$\hat{\mathcal{P}}_i + \hat{\mathcal{P}}_j \equiv \hat{\mathcal{P}}_{i,j} \quad \text{при} \quad \langle f_i | f_j \rangle = 0. \quad (\text{В.30})$$

Напомним, что при суммировании по полному набору векторов состояния  $i$  получается единичный оператор (вне зависимости от конкретного базиса  $f$ ):  $\sum_i \hat{\mathcal{P}}_i = \sum_i |f_i\rangle\langle f_i| = \hat{\mathbb{1}}$  (1.16).

Наконец, вероятность обнаружить в произвольном состоянии  $|f\rangle$  компоненту, отвечающую вектору состояния  $|f_i\rangle$ , есть

$$w_{i/f} = \langle f|\hat{\mathcal{P}}_i|f\rangle \equiv \langle f|\hat{\mathcal{P}}_i|f\rangle. \quad (\text{B.31})$$

## § В.6. О векторном анализе

Векторный анализ — простое объединение векторной алгебры с дифференцированием. В его основе лежат операции с векторным дифференциальным оператором

$$\nabla \equiv \partial \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \equiv \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \equiv (\partial_x, \partial_y, \partial_z). \quad (\text{B.32})$$

Операции взятия градиента от функции, дивергенции и ротора от вектора **определяются** следующим образом

$$\begin{aligned} \text{grad } f(\mathbf{r}) &\equiv \nabla f(\mathbf{r}) \equiv \left( \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial x}, \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial y}, \frac{\partial f(\mathbf{r})}{\partial z} \right), \\ \text{div } \mathbf{G}(\mathbf{r}) &\equiv (\nabla \cdot \mathbf{G}(\mathbf{r})) \equiv \partial G_i(\mathbf{r})/\partial x_i, \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

$$\text{rot } \mathbf{G}(\mathbf{r}) \equiv [\nabla \times \mathbf{G}(\mathbf{r})] \Rightarrow (\text{rot } \mathbf{G}(\mathbf{r}))_i = \varepsilon_{ikl} \nabla_k G_l.$$

Наглядный смысл понятия *градиент* ясен из этого определения: направление этого вектора указывает направление наиболее быстрого изменения функции, а величина — скорость этого изменения — как обычная производная. *Ротор вектора*  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  показывает, как этот вектор меняется в пространстве по величине и по направлению, такое изменение описывает «закрученность» вектора  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  в пространстве (по немецки *rotor* — вихрь). Впрочем, в англоязычной литературе иногда вместо значка *rot* пишут *curl* (вихрь).

Все правила векторного анализа сводятся к следующим:

- компоненты вектора  $\nabla \equiv \partial$  — просто операции частного дифференцирования по координатам;

- операции  $\text{div}$  и  $\text{rot}$  просто скалярные и векторные произведения вектора  $\nabla$  с другими векторами;
- в действиях с оператором  $\nabla$  перестановки этого оператора и каких-нибудь векторных функций выполняются по правилам дифференцирования по частям;
- использование покомпонентной записи позволяет наилучшим образом избегать ошибок;
- для любой функции от вектора  $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$  имеем  $\partial f(\mathbf{R})/\partial \mathbf{r} = -\partial f(\mathbf{R})/\partial \mathbf{r}'$ , например,  $\text{div}_{\mathbf{r}} \mathbf{F}(\mathbf{R}) = -\text{div}_{\mathbf{r}'} \mathbf{F}(\mathbf{R})$ .

Отметим, что при использовании криволинейных координат употребление указанных правил *выглядит* не вполне тривиально.

### § В.7. Момент импульса в четырёхмерном эвклидовом пространстве

Генераторы преобразований группы вращений четырёхмерного эвклидова пространства  $O(4)$  (естественные обобщения генераторов преобразований группы вращений трёхмерного эвклидова пространства  $O(3)$  — компонент вектора момента импульса, обсуждавшихся в гл. 8) образуют четырёхмерный тензор момента импульса (здесь, как обычно,  $p_0 = -i\hbar\partial/\partial x_0$ )

$$L_{\mu\nu} = x_\mu p_\nu - x_\nu p_\mu \Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & t_x & t_y & t_z \\ -t_x & 0 & L_z & -L_x \\ -t_y & -L_z & 0 & L_y \\ -t_z & L_x & -L_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{В.34})$$

Поскольку  $O(3) \in O(4)$ , естественно, что  $L_x$ ,  $L_y$  и  $L_z$  — компоненты обычного вектора момента импульса. Квадрат длины нашего тензора  $L_{\mu\nu}L^{\mu\nu} = \mathbf{t}^2 + \mathbf{L}^2$ . (В задаче о трёхмерном осцилляторе все эти операторы выражаются через операторы  $a_i^\dagger a_j$  (9.30).)

Перестановочные соотношения между компонентами этого тензора легко получаются из их определений и имеют вид

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar e_{ijk} \hat{L}_k, \quad [\hat{L}_i, \hat{t}_j] = i\hbar e_{ijk} \hat{t}_k, \quad [\hat{t}_i, \hat{t}_j] = i\hbar e_{ijk} \hat{L}_k. \quad (\text{В.35})$$

### § В.8. Метод комплексной плоскости для получения правил сшивки в квазиклассическом приближении

Рассмотрим волновые функции в плоскости комплексной переменной  $x$ .

◇ **Игрушечный пример.** Рассмотрим уравнение  $w(x)'' - g^2 w(x) = 0$  при  $g > 0$  и его решение  $w = a e^{gx} + b e^{-gx}$ . В правой полуплоскости при  $\text{Re}(x) \gg 1$  асимптотика этого решения имеет вид  $w \approx a e^{gx}$ , в левой полуплоскости при  $-\text{Re}(x) \gg 1$  асимптотика этого решения имеет совершенно другой вид  $w \approx b e^{-gx}$ . Находясь в правой полуплоскости, нельзя угадать, как выглядит решение в левой полуплоскости, и наоборот. Только на **линии Стокса**  $\text{Re} x = 0$  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 (6.5), для которых точки поворота — точки ветвления (A. Zwaan, 1929). В части комплексной плоскости  $x$ , удовлетворяющей условиям квазиклассичности, решение можно записать в виде суперпозиции асимптотик (6.5), но коэффициенты этой суперпозиции могут быть неодинаковыми в разных частях этой области.

Запишем приближение  $U(x) = E + F(x - a)$  вблизи точки поворота  $x = a$ . Это приближение не меняет свойств аналитичности потенциала, а стало быть и решений уравнения. Обозначая  $z = (8mF/9\hbar^2)^{1/3}(a - x)$ , мы преобразуем уравнение Шредингера к виду  $d^2\psi/dz^2 + (9/4)z\psi = 0$ . Выбирая в (6.5)  $x_0 = a$ , получаем выражения для квазиклассических асимптотик в виде

$$\psi_{\pm k} = z^{-1/4} \exp(\pm iz^{3/2}). \quad (\text{В.36})$$

(При  $z \rightarrow -z$  асимптотики  $\psi_{\pm k}$  превращаются в  $e^{-i\pi/4}\psi_{\pm z}$ .)

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 определённости 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 (6.12) и квазиклассическое приближение. Примем, что физическая волновая функция (для реальных  $z$ ) отвечает предельному переходу на разрез из верхней полуплоскости  $z$ . 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 (В.36) имеют вид

$$\psi_{\pm k} = e^{-i\phi/4} \rho^{-1/4} \exp(\pm i\rho^{3/2} e^{3i\phi/2}). \quad (\text{В.37})$$

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)

$$\psi_{\pm k}^{\text{В}} = \rho^{-1/4} e^{\pm i\rho^{3/2}}, \quad \psi_{\pm k}^{\text{Н}} = e^{-i\pi/2} \rho^{-1/4} e^{\mp i\rho^{3/2}}. \quad (\text{В.38})$$

◇ Асимптотика решения, удовлетворяющего этим граничным условиям, имеет вид

$$\psi = C_+ \psi_{+k} + C_- \psi_{-k}. \quad (\text{В.39})$$

Коэффициенты  $C_{\pm}$  могут различаться в разных областях  $z$ -плоскости. Например, в соответствии с (В.37) при переходе через разрез

$$\psi^{\text{В}} = C_+ \psi_{+k} + C_- \psi_{-k} \Rightarrow \psi_{\pm k}^{\text{Н}} = -i(C_- \psi_{+k} + C_+ \psi_{-k}). \quad (\text{В.40})$$

∇ Но что означает сумма (В.39)? 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  $\psi_{+k}$  или  $\psi_{-k}$  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  $\psi_{+k}$  и  $\psi_{-k}$  возможно. Действительно, пусть на луче  $\text{Im } z^{3/2} = 0$  мы имеем некоторую волновую функцию  $\psi_1$  с асимптотикой (В.39) с известными коэффициентами  $C_{\pm}$ , удовлетворяющую граничным условиям. Определим на том же луче ещё и волновую функцию  $\psi_2$ , ортогональную к  $\psi_1$  и Вронскиан  $W = \psi_2' \psi_1 - \psi_1' \psi_2$ . Асимптотика функции  $\psi_2$  при  $\text{Im } z^{3/2} \neq 0$  определяется по поведению в этой области  $\psi_1$  из условия сохранения Вронскиана. Это делает осмысленным слежение за обоими независимыми решениями.

• **Линии Стокса и параметры Стокса.** Особую роль играют линии, на которых действительная часть фазы решений (В.37) обращается в нуль, это лучи  $\phi = 0$  (луч 0A),  $\phi = 2\pi/3$  (луч 1A) и  $\phi = 4\pi/3$  (луч 2A) — см. рис. 15. На этих линиях — сопряжённых линиях Стокса — антистоксовых линиях обе асимптотики  $\psi_{+k}$  и  $\psi_{-k}$  — одного порядка величины<sup>1</sup>. На этом рисунке в каждом секторе указана та из функций  $\psi_{\pm k}$ , которая не убывает.

Напротив, на линиях Стокса обращается в нуль мнимая часть фазы второго сомножителя (В.37), эти линии образуют лучи  $\phi = \pi/3$   $\phi = 5\pi/3$  (лучи 1S и 2S соответственно),  $\phi = \pi$  (луч 3S). Линии Стокса делят пополам области, ограниченные антистоксовыми линиями.

В каждом секторе между двумя антистоксовыми линиями функция  $\psi_{+k}$  или  $\psi_{-k}$  либо возрастает, либо убывает, при переходе через антистоксову линию роли меняются. На линиях Стокса одна из асимптотик  $\psi_{+k}$  или  $\psi_{-k}$  растёт всего быстрее, а другая из этих асимптотик убывает всего быстрее.

Выясним, что происходит с общим решением (В.39) при возрастании  $\phi$  от нуля (луч 0A). При  $0 < \phi < 2\pi/3$  (вплоть до луча 1A) функция  $\psi_{+k}$  экспоненциально мала, а  $\psi_{-k}$  экспоненциально велика. При изменении  $\phi$  отброшенные поправки к  $\psi_{-k}$  перестраиваются, и после первой линии Стокса (луч 1S)

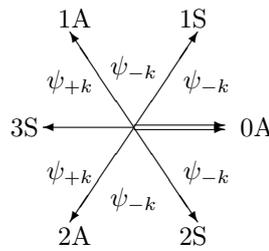


Рис. 15

<sup>1</sup>Понятия линий Стокса и параметров Стокса (см. ниже) сохраняют смысл и вдали от точек поворота, где разложение (6.12) не работает, лишь бы работало квазиклассическое приближение. Если в точке поворота в нуль обращается  $q$  первых производных потенциала, то из точки поворота выходит  $q + 3$  линии Стокса.

можно говорить уже, что в рамках нашего приближения коэффициент при падающей асимптотике изменился (пропорционально коэффициенту при растущей асимптотике  $C_-$ ),

$$C_+ \rightarrow C_+^1 = C_+ + T_1 C_-, \quad C_- \rightarrow C_-^1 = C_- . \quad (\text{В.41a})$$

С этими коэффициентами наше решение вступает в сектор между антистоксовыми линиями 1А и 2А. Здесь уже функция  $\psi_{-k}$  экспоненциально мала, а  $\psi_{+k}$  экспоненциально велика так, что при переходе через линию Стокса 3S

$$C_-^1 \rightarrow C_-^2 = C_-^1 + T_2 C_+^1, \quad C_+^1 \rightarrow C_+^2 = C_+^1 . \quad (\text{В.41b})$$

На антистоксовой линии 2А растущая и падающая экспоненты опять меняются местами, и при переходе через линию Стокса 2S

$$C_+^2 \rightarrow C_+^3 = C_+^2 + T_3 C_-^2, \quad C_-^2 \rightarrow C_-^3 = C_-^2 . \quad (\text{В.41c})$$

Числа  $T_i$  называют *параметрами Стокса*.

С коэффициентами  $C_{\pm}^3$  мы подходим к лучу 0А и должны были бы получить исходное выражение (В.39). Однако мы пришли на нижний берег разреза, где  $\psi_{\pm k}^H = -i\psi_{\mp k}^B$  (В.38) (как и ранее, значки «H» и «B» указывают на нижний и верхний берега разреза соответственно).

Собирая все преобразования (В.41), мы получаем на нижнем берегу разреза

$$\begin{aligned} \psi &= [T_2 C_+ + (1 + T_1 T_2) C_-] \psi_{-k} + \\ &+ [C_+ (1 + T_2 T_3) + (T_1 + T_3 + T_1 T_2 T_3) C_-] \psi_{+k} . \end{aligned}$$

С другой стороны применение (В.38) даёт на том же берегу другое по форме выражение  $\psi = e^{-i\pi/2} [C_+ \psi_{-k} + C_- \psi_{+k}]$ . Приравнивая эти выражения, получаем

$$T_1 = T_2 = T_3 = e^{-i\pi/2} = -i . \quad (\text{В.42})$$

• **Получение правил шивки.** Рассмотрим случай, когда решение убывает при  $z \rightarrow -\infty$  (в силу требования нормируемости волновой функции), т.е. асимптотика (на линии Стокса 3S) имеет вид  $\psi = (-z)^{-1/4} e^{-(-z)^{3/2}}$ , где  $-z = \rho$ . В предшествующих обозначениях на линии 3S мы имеем  $C_- = e^{i\pi/4}$ ,  $C_+ = 0$ .

Совершим далее переход на нижний берег разреза через нижнюю полуплоскость переменной  $z$ , с последующим переходом на верхний берег разреза с помощью соответствия (В.40). Вплоть до антистоксовой линии  $2A$  наша функция была убывающей, на этой линии она стала осциллирующей, а затем превратилось в растущую. После перехода через линию Стокса  $2S$  в соответствии с предыдущим построением к этой возрастающей функции добавилась убывающая функция с коэффициентом  $T_3$ . В итоге на нижний берег разреза  $0A$  прибыло решение

$$\begin{aligned} \frac{e^{-i\pi/4}}{\rho^{1/4}} \left( e^{-i\rho^{3/2}} + T_3 e^{i\rho^{3/2}} \right) &\equiv \frac{1}{\rho^{1/4}} \left( e^{-i(\rho^{3/2} + \pi/4)} - e^{i(\rho^{3/2} + \pi/4)} \right) \equiv \\ &\equiv -2i \rho^{-1/4} \sin(\rho^{3/2} + \pi/4) \rightarrow -\frac{2i}{\sqrt{k}} \sin \left( \int_a^x k(x) dx + \frac{\pi}{4} \right). \end{aligned} \quad (\text{В.43})$$

Используя теперь правило перехода через разрез (В.40), мы получаем, что убывающей в классически недостижимую область асимптотике в области классического движения переходит в решение «синусного типа», т.е. мы получили первое правило сшивки (6.13). Второе из этих правил сшивки таким способом не получается, поскольку под растущей экспонентой может «скрываться» падающая, причём с любым коэффициентом. Удобнее стартовать с волновой функции  $\frac{1}{\sqrt{k}} \cos(\int_a^x k dx + \pi/4)$ , которая ортогональна предыдущей в физически достижимой области, записать её как сумму экспонент, и для каждой из них повторить изложенную выше процедуру в противоположном направлении. Сохранение Вронскиана гарантирует правильность полученного ответа.

## Приложение С

# Скрытые параметры и квантовая механика [31]

В первые годы после создания квантовой механики некоторые физики полагали, что существует динамическая теория классического типа, содержащая неизвестные нам пока переменные (*скрытые параметры*), в которой все результаты предсказываются однозначно, а квантовая механика с её вероятностными предсказаниями возникает как результат усреднения по этим скрытым параметрам (подобно тому, как вероятностные предсказания возникают в классической статистической физике). В 1934 г. А. Эйнштейн, Б. Подольский и Н. Розен (EPR) предъявили аккуратную формулировку этой концепции.

В применении к распаду гипотетической бесспиновой частицы С на два нейтрона А и В аргументация EPR выглядит следующим образом. По условию, спины нейтронов А и В направлены противоположно. Согласно концепции скрытых параметров, обнаружив, что нейтрон А имеет, например, положительную проекцию спина на ось  $z$ , мы уверенно можем говорить, что для нейтрона В эта проекция отрицательна, причин для появления других возможностей нет. Вскоре после появления работы EPR Н. Бор и Л.И. Мандельштам одновременно и независимо показали, что в применении к описываемому опыту *утверждение об антипараллельности спинов А и В в рамках квантовой теории носит вероятностный характер, могут реализоваться и другие возможности, помимо предъявленных EPR*, т. е. результат квантовой механики не получается в теории скрытых параметров — это разные теории.

В 1964 г. J.S. Bell построил примеры ситуаций, в которых различие между теорией со скрытыми параметрами и квантовой теорией можно проверить на опыте, и вскоре эксперименты показали, что реальность описывается квантовой теорией, а не теорией со скрытыми параметрами. Один из таких примеров (по материалам книги [28]) предоставил нам А. Г. Грозин.

**Постановка опыта.** Пусть в источнике  $C$  частицы со спином 0 распадаются на пары нейтронов (спин  $1/2$ ), которые регистрируются в детекторах  $A$  и  $B$ , расположенных на одной прямой по разные стороны от источника. В каждом из этих детекторов измеряется проекция спина прилетевшего сюда нейтрона на какую-нибудь ось, перпендикулярную прямой  $ACB$ .

$$A \leftarrow C \rightarrow B.$$

(Это детектор с неоднородным магнитным полем, здесь нейтроны с магнитным моментом, направленном вдоль поля, отклоняются в одну сторону, а против поля — в другую.) По выбору экспериментатора ось каждого из детекторов  $A$  и  $B$  можно повернуть в одном из трёх возможных направлений, образующих друг с другом углы  $120^\circ$ , (*ориентации 1, 2, 3*)<sup>1</sup>. Мы делаем, скажем,  $10^6$  экспериментов такого типа: в  $C$  рождается пара нейтронов; ориентации детекторов  $A$  и  $B$  выбираем случайным образом и фиксируем, а затем записываем результаты. Получится длинная лента записей типа

$$A1B2 + -, A3B1 + -, A2B2 - +, A3B2 - -, \dots$$

(Например,  $A1B2 + -$  означает, что детектор  $A$  имел ориентацию 1, а детектор  $B$  — ориентацию 2; первый обнаружил положительную проекцию спина на свою ось, а второй отрицательную) и т. д. *Далее рассматриваются только случаи  $A \nparallel B$ , когда оси детекторов ориентированы по-разному.*

**Вариант со скрытыми параметрами.** Согласно логике скрытых параметров, нейтрон, летящий, например, в сторону  $A$  имеет какие-то определённые проекции спина на каждую из трёх осей, *хотя при использовании квантового описания нам не удастся узнать их величины.* Это значит, что для каждого детектора все нейтроны можно разделить на 8 групп:  $+++$ ,  $++-$ ,  $+ - +$ ,  $+ - -$ ,  $- + +$ ,  $- + -$ ,  $- - +$ ,  $- - -$  (если нейтрон принадлежит группе  $++-$ , то, повернув детектор в положение 1 или 2, мы получим  $+$ , а в положении 3 детектор покажет  $-$ ). Поскольку суммарный спин равен нулю, два нейтрона, родившиеся в источнике  $C$ , имеют противоположные проекции спинов на любую ось. Если один нейтрон имеет состояние  $++-$ , то другой имеет состояние  $- - +$ , и т. д.

<sup>1</sup> Сделав выбор, как повернуть оси детекторов, можно уже после того, как нейтроны вылетели из источника  $C$  и направились к детекторам  $A$  и  $B$  (отложенный выбор Уиллера)

Пусть, например, родилась пара нейтронов в состояниях  $++-$  и  $-+ -$ . Тогда для всех возможных положений детекторов  $A \nparallel B$  мы получим

$$A1B2+-, A1B3++, A2B1+-, A2B3++, A3B1--, A3B2--.$$

Таким образом, состояния  $+-$  и  $-+$  получились с вероятностью  $1/3$ , а  $++$  и  $--$  с вероятностью  $2/3$ . Тот же самый ответ получается и для состояний  $+-+$ ,  $+--$ ,  $-++$ ,  $-+-$ ,  $---$ .

Если пары родились в состояниях  $+++$  и  $---$ , то всегда получаются результаты  $+-$  и  $-+$ . Таким образом, получился частный случай *неравенств Белла*:

$$\text{В теории со скрытыми параметрами вероятность результатов } +- \text{ и } -+ \text{ больше } 1/3 \quad (\text{C.1})$$

(с учётом начальных состояний  $+++$  и  $---$  эта вероятность  $= 1/2$ ).

**В квантовой механике** мы используем технику гл. 10 и § В.5.

Запишем, прежде всего, общую волновую функцию пары нейтронов, вылетевших при распаде, обозначая нейтроны по имени точек наблюдения. Согласно (12.7), это

$$|\psi_0\rangle = \frac{|(A+)\rangle|(B-)\rangle - |(A-)\rangle|(B+)\rangle}{\sqrt{2}}. \quad (\text{C.2})$$

Знаки  $+$  и  $-$  отвечают проекциям спина на любую избранную ось.

Пусть ось одного детектора ориентирована вдоль  $\mathbf{n}_A$ , а другого вдоль  $\mathbf{n}_B$ . Оператор проектирования на состояния, в которых знаки проекций первого спина на ось  $\mathbf{n}_A$ , а второго  $-$  на ось  $\mathbf{n}_B$  противоположны, есть сумма произведений соответствующих операторов (10.8) для каждого из них,

$$\hat{P}_{+-} = \hat{P}_{A+} \otimes \hat{P}_{B-} + \hat{P}_{A-} \otimes \hat{P}_{B+} = \frac{1}{2} [1 \otimes 1 - (\boldsymbol{\sigma}_A \mathbf{n}_A) \otimes (\boldsymbol{\sigma}_B \mathbf{n}_B)]. \quad (\text{C.3})$$

В соответствии с (10.8) вероятность того, что проекции спинов на эти оси противоположны, есть

$$w_{+-} = \langle \psi_0 | \hat{P}_{+-} | \psi_0 \rangle \equiv \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \langle \psi_0 | (\boldsymbol{\sigma}_A \mathbf{n}_A) \otimes (\boldsymbol{\sigma}_B \mathbf{n}_B) | \psi_0 \rangle. \quad (\text{C.4})$$

Рассмотрим для примера ситуацию  $A1B2$ . Направим ось  $z$  вдоль  $\mathbf{n}_A = (0, 0, 1)$ , для оси  $\mathbf{n}_B$ , направленной под углом  $120^\circ$  к оси  $z$ , имеем  $\mathbf{n}_B = \frac{1}{2}(\sqrt{3}, 0, -1)$ . При этом вероятность (С.4) принимает вид  $w_{+-} = \frac{1}{2} + \frac{1}{4}\langle\psi_0|\hat{\sigma}_{z,A} \otimes \hat{\sigma}_{z,B}|\psi_0\rangle$  (вектор  $[\hat{\sigma}_{x,B} \equiv (\hat{\sigma}_{+,B} + \hat{\sigma}_{-,B})/2]|\psi_0\rangle$  ортогонален вектору  $|\psi_0\rangle$ , и это слагаемое из  $(\boldsymbol{\sigma}_B \mathbf{n}_B)$  даёт в ответ нулевой вклад). Таким образом, окончательно

$$w_{+-} = \frac{1}{2} - \frac{1}{4} = \frac{1}{4}. \quad (\text{C.5})$$

Ясно, что этот ответ справедлив для любой пары ситуаций  $A \nparallel B$ . Таким образом,

$$\text{в квантовой механике вероятность результата } +- \text{ или } -+ \text{ равна } 1/4. \quad (\text{C.6})$$

Итак, в квантовой механике классическое неравенство Белла (С.1) нарушается, и это утверждение доступно экспериментальной проверке.

Для доказательства недопустимости теории со скрытыми параметрами достаточно обнаружить нарушение неравенства Белла хотя бы в одном из таких экспериментов. Эксперименты с испусканием пар фотонов, проводившиеся рядом групп (в немного другой постановке опытов), начиная с 1972 г. [29], подтвердили квантово-механическое утверждение о невозможности построения квантового описания мира с помощью классических скрытых параметров.

- Впервые теорема о невозможности приведения математической модели квантовой механики к той или иной форме классического вероятностного описания была доказана при некоторых ограничениях фон Нейманом в 1932 г. Эти ограничения были сняты в работах выпускника НГУ Е.И. Зельманова в 1980 г. (Филдсовская премия 1984г.)

## Приложение D

# Переходы с изменением Гильбертова пространства

При изучении систем с зависящим от времени гамильтонианом специального внимания требуют переходы, в которых изменение гамильтониана сопровождается изменением Гильбертова пространства. Мы рассмотрим этот вопрос на простейшем примере задачи о бесконечно глубокой потенциальной яме с меняющейся шириной, о которой говорилось на стр. 32 и 356.

### § D.1. Постановка задачи

Рассмотрим бесконечно глубокую прямоугольную яму со стенками  $[0, b]$  (1.20). Стационарные состояния этой задачи (1.21)  $|n\rangle_i$  образуют базис Гильбертова пространства  $\mathcal{H}_i \equiv \mathcal{H}(0, b)$  квадратично интегрируемых функций, определённых на отрезке  $[0, b]$  и обращающихся в нуль на его границах.

При переходе к другой яме  $i \rightarrow f$ , с изменением ширины  $b \rightarrow b\alpha$  получающиеся состояния образуют базис другого Гильбертова пространства  $\mathcal{H}_f \equiv \mathcal{H}(0, b\alpha)$ , они описываются формулами (1.21) с естественной заменой  $b$  на  $b\alpha$ :  $|n\rangle_f$ .

На стр. 356 мы вычислили вероятность *мгновенного* перехода  $|n\rangle_i \rightarrow |k\rangle_f$ . Для случая  $\alpha < 1$  она имеет вид (16.19).

«Простое» видоизменении задачи выглядит очень естественно, но порождает серьёзные трудности:

Найти ту же вероятность в случае, когда граница ямы сдвигается за конечное время $T$ по некоторому закону $b \rightarrow b\alpha(t)$ , где $\alpha(T) = \alpha$ .	(D.1)
---	-------

Эту задача описывается уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{d\psi(x,t)}{dt} = \hat{H}\psi(x,t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + U(x) + \hat{V}_P(x,t) \right) \psi(x,t) \quad (\text{D.2a})$$

в котором исходный потенциал  $U(x)$  (1.20) дополняется возмущением

$$\hat{V}_P(x,t) = \begin{cases} 0 : & x \in (-\infty, b\alpha(t)), (b, \infty), \\ -\infty : & x \in (b\alpha(t), b]; \\ 0 : & x \in (-\infty, b), (b\alpha(t), \infty), \\ \infty : & x \in (b, b\alpha(t)]. \end{cases} \quad \text{at } \alpha < 1, \quad (\text{D.2b})$$

Стандартные вычисления с этим возмущением невозможны по двум причинам.

- (i) Матричные элементы возмущения  $\hat{V}_P$  либо бесконечны, либо равны нулю.
- (ii) Стандартная форма теории возмущений § 16.3 включает в себя разложение зависящих от времени волновых функций по волновым функциям начального состояния. Однако, эти функции принадлежат разным Гильбертовым пространствам  $\mathcal{H}(0, b)$  и  $\mathcal{H}(0, b\alpha(t))$ , и например при  $\alpha(t) > 1$  соответствующее разложение, очевидно, не существует.

Тем не менее, следует ожидать, что существует область параметров, в которой возмущение можно считать слабым так, что должна быть применима какая-то форма теории возмущений.

Эта ситуация порождает две разных задачи:

1. Охарактеризовать новые явления (если они существуют), возникающие при изменении Гильбертовых пространств.
2. Предъявить не очень громоздкий регулярный способ вычисления вероятности перехода, обеспечивающий применимость разумной формы известных приближённых методов в тех случаях, когда этого естественно ожидать.

## § D.2. Регуляризация

Следует заметить, прежде всего, что вычисления, из которых получались вероятности переходов (16.19), использовали не просто волновые функции состояний, определённых в начальной и конечной ямах,

но и их продолжения вне ям (где эти функции равны нулю). Иными словами, мы использовали тот факт, что Гильбертовы пространства  $\mathcal{H}(0, b)$  и  $\mathcal{H}(0, b\alpha(t))$  суть подпространства единого Гильбертова пространства  $L_2$  функций, непрерывных и квадратично интегрируемых на действительной оси  $(-\infty, \infty)$ , т. е. что  $\mathcal{H}(0, b), \mathcal{H}(0, b\alpha) \subset L_2$ .

В действительности, бесконечно глубокая яма — только приближение, удобное для вычислений. Для описания физической ситуации полезно использовать *регуляризацию*, более правдоподобно описывающую реальность: *В уравнении Шредингера (D.2) бесконечно глубокая яма заменяется на яму конечной глубины, которая не меняется при изменении ширины ямы.* Взамен (1.20), регуляризованный потенциал имеет вид

$$U_{reg}^{(1)}(x) = \begin{cases} V : x \in (-\infty, 0), \\ 0 : x \in [0, b], \\ V : x \in (b, \infty). \end{cases} \quad (D.3)$$

Регуляризация почти не меняет свойства  $n$ -го состояния, пока мало отношение энергии этого состояния к  $V$ , т. е.

$$\xi_n = E_n/V = (\pi n \hbar)^2 / (2mb^2V) \ll 1.$$

При приближении  $\xi_n$  к 1 регуляризованная картина уже не похожа на нерегуляризованную.

При этом подходе и начальная и конечная ситуации описываются функциями, принадлежащими оснащённому Гильбертову пространству<sup>1</sup>  $\mathcal{OL} \supset L_2$ . Наша задача отвечает пределу  $V \rightarrow \infty$  (*снятие регуляризации*).

Подчеркнём, что полный набор функций нерегуляризованной системы состоит из бесконечного набора состояний дискретного спектра. Полный набор функций регуляризованной системы содержит конечный набор состояний дискретного спектра и бесконечный набор состояний непрерывного спектра. При снятии регуляризации число состояний дискретного спектра увеличивается до бесконечности (оставаясь счётным), а состояния непрерывного спектра исчезают.

С использованием этой регуляризации вычисления становятся осмысленными, но всё ещё чрезмерно громоздкими.

<sup>1</sup>См. обсуждение на стр. 30.

### § D.3. Новое явление

Изучим более детально случай мгновенного изменения ширины ямы. Рассмотрим вероятность перехода из некоторого состояния начальной ямы  $|n\rangle_i$  в любое состояние конечной ямы  $|k\rangle_f$ . Эту вероятность можно записать в виде

$$W(n; i|f) = \sum_k \left| M_{nk}^{if} \right|^2 = \langle n|_i \left\{ \sum_k |k\rangle_f \langle k|_f \right\} |n\rangle_i \equiv \langle n|_i \hat{\mathbb{I}}_f |n\rangle_i. \quad (\text{D.4})$$

Здесь определён оператор  $\hat{\mathbb{I}}_f \equiv \sum_k |k\rangle_f \langle k|_f$ . В пространстве  $\mathcal{H}_f$  он действует как единичный оператор (ср. (1.16)). Соотношение (D.4) определяет фактически как именно действует этот оператор в другом пространстве  $\mathcal{H}_i$ . Чтобы увидеть это, можно использовать два подхода:

- (i) Просуммировать вероятности индивидуальных переходов (16.19).
- (ii) Использовать определение  $\hat{\mathbb{I}}_f$  как проектора на отрезок  $(0, b\alpha)$ .

◇ Для расширяющейся ямы ( $\alpha > 1$ ) мы имеем

$$W(n; i|f) = \int_0^b dx \psi_{n,i}^*(x) \psi_{n,i}(x) = 1 \quad (\text{нормировка}).$$

Иными словами, функция  $|n\rangle_i$ , нормированная на начальном интервале, сохраняет нормировку на Гильбертовом пространстве с увеличенным носителем.

◇ Для сужающейся ямы ( $\alpha < 1$ ) начальный нормировочный интеграл теряет интервал  $(b\alpha, b)$ , так что мы имеем

$$W(n; i|f) = \int_0^{b\alpha} dx \psi_{n,i}^*(x) \psi_{n,i}(x) < 1.$$

Помимо этого, изучаемую вероятность можно получить суммированием индивидуальных вероятностей (16.19). Естественно, что результаты вычислений совпадают<sup>1</sup>

$$W(n; i|f) = \left\{ \begin{array}{l} \int_0^{b\alpha} dx \frac{2}{b} \sin^2 \left( \frac{\pi n x}{b} \right) \\ \frac{4\alpha}{\pi^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k^2 \sin^2(\pi \beta)}{(k^2 - n\alpha^2)^2} \end{array} \right\} = \alpha \left( 1 - \frac{\sin(2\pi n\alpha)}{2\pi n\alpha} \right). \quad (\text{D.5})$$

<sup>1</sup>Заметим, что в случае, когда  $n\alpha$  — целое число,  $W_{nk}^{if} = \alpha \delta_{k, n\alpha}$  и  $W(n; i|f) = \alpha$  — см. задачу 15.1.

• Таким образом, при  $\alpha < 1$  часть вероятности исчезает. В обсуждавшейся картине регуляризации это означает, что *некоторая часть начального состояния ушла в непрерывный спектр*, который должен был исчезнуть при снятии регуляризации.

По построению ясно, что подобное явление имеет место и в более общем случае сдвигающихся границ, если конечная яма не покрывает полностью начальную, например, при сдвиге границ  $(0, b) \rightarrow (a, c)$  при  $a > 0, c > b$ . Можно говорить, что в этом случае необходима более аккуратная регуляризация.

Однако, обсуждение в терминах предложенной простой регуляризации представляется более интересным. В этой схеме обнаруживается, что описание в терминах только начальной и конечной ям оказывается неполным. Оно должно быть дополнено информацией о большой системе, объемлющей обе эти ямы. В рассмотренном случае свойства этой большой системы достаточно ясны.

### **D.3.1. Замечание о возможных применениях. Проблемы для исследования**

*При стандартном описании фазовых переходов и начальное и конечное Гильбертово пространство задаются обычно перечислением набора элементарных возбуждений. Обсуждаемая «потеря вероятности» означает, что полное описание требует включения обычно не учитываемых степеней свободы.*

*Для фазовых переходов в веществе свойства этой большой системы почти очевидны. Наиболее интересны физические задачи о переходах с изменением Гильбертова пространства, в которых свойства большой системы совсем не очевидны, часть начального состояния уходит «неизвестно куда». Пример такого рода являет космологический фазовый переход с потерей электрослабой симметрии (после стадии инфляции). До перехода все частицы были безмассовыми, Гильбертово пространство было суперпозицией асимптотических состояний этих частиц, оно было несепарабельным. После перехода все частицы (кроме фотона) стали массивными и, более того, многие из них стали нестабильными (как  $W$ -бозон, бозон Хиггса и др.). Эти нестабильные частицы не имеют асимптотических состояний, и должны быть исключены из базиса Гильбертова пространства. Таким образом, базисы начального и конечного Гильбертовых*

пространств не переходят прямо друг в друга. Вряд ли можно уверенно говорить сейчас, как выглядит большая система, содержащая оба эти Гильбертова пространства. Каким физическим явлениям отвечает ожидаемая «потеря вероятности»?

При его построении почти всегда он используется явно в ряде книг при построении теории квантованных полей и элементарных частиц.)

■ Классическое определение матрицы перехода ( $S$ -матрицы) в теории квантованных полей явно или неявно использует адиабатическое допущение Эренфеста (см. § 3.4). Имеется в виду, что в далеком прошлом и будущем взаимодействие отсутствовало, а затем оно включилось очень медленно — адиабатически. (Такой подход фактически используется в § 5.3 и в гл. 16, он чётко сформулирован в книге [30]. Это позволяет определить начальные и конечные состояния реакций как асимптотические состояния свободных частиц. Эта операция включения сопровождается изменением Гильбертова пространства (это особенно очевидно для неабелевых калибровочных полей). Не приводит ли это изменение Гильбертова пространства к существенным эффектам, в особенности для неабелевых калибровочных полей?

■ Что происходит с пространством состояний Стандартной Модели при переходе от безмассовых частиц с недостаточно расслоённым пространством состояний (с эффектом Блоха–Нордсика) к массивным нестабильным частицам, где пространство состояний уменьшается? Что происходит с энергией вакуума при этом переходе?

## § D.4. Методы вычисления

Основным параметром задачи для эволюции  $n$ -го состояния является отношение времени движения стенок  $T_c \sim 1/\alpha'_t$  к характерному времени жизни на этом уровне  $\tau_n = \hbar/E_n$ .

При медленном движении стенок  $T_c > \tau_n$  удобно использовать адиабатическое приближение, кратко описанное в § 16.8. В этом приближении вероятность перехода  $n \rightarrow n$  близка к 1, номер состояния  $n$  похож на адиабатический инвариант.

• Если условие  $T_c > \tau_n$  нарушается, для вычисления без аномально больших промежуточных величин удобно использовать отображение ямы с движущимися стенками на начальную яму.

Само по себе отображение сводится к изменению масштаба координат  $y = x/\alpha(t)$ . В этих новых переменных форма потенциала  $U(y)$  не зависит от времени (1.20). Однако, вид кинетической энергии меняется,  $d/dx \rightarrow \alpha^{-1}\partial/\partial y + y^{-1}\partial/\partial\alpha$ . В дополнение к этому удобно преобразовать вид волновой функции и изменить шкалу времени:

$$y = x/\alpha(t), \quad \psi = \sqrt{y}\chi, \quad \tau = \int_0^t \frac{dt}{\alpha^2(t)}. \quad (\text{D.6})$$

После этого уравнение Шредингера преобразуется к виду:

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{d\chi}{d\tau} &= (\hat{H}_1 + \hat{V})\chi; \\ \hat{H}_1 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{3}{4y^2} \right) + U(y), \\ \hat{V} &= -\frac{\hbar^2}{2my^2} \left( \alpha^2 \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + 2y\alpha \cdot \frac{\partial^2}{\partial y \partial \alpha} \right). \end{aligned} \quad (\text{D.7})$$

Последнее из уравнений (D.6) позволяет, в принципе, получить и зависимость  $\alpha$  от  $\tau$ . Это позволяет преобразовать дифференцирование по  $\alpha$  в дифференцирование по новому «времени»  $\tau$ .

Рассмотрим далее  $\hat{H}_1$  как невозмущённый гамильтониан, а слагаемое  $\hat{V}$  как возмущение.

Собственные состояния гамильтониана  $\hat{H}_1$  — непрерывные функции, исчезающие на границах ямы. Они выражаются через функцию Бесселя  $J_1(z)$  и значения её нулей  $z_n$ , т. е. через решения уравнения  $J_1(z_n) = 0$  ( $C_n$  — константа нормировки):

$$\begin{aligned} \chi_n^w(y, \tau) &= C_n \sqrt{y} J_1(yz_n/b) e^{-iE_n^w \tau/\hbar}, \quad E_n^w = \frac{(\pi n \hbar)^2}{2mb^2} u_n^2, \\ z_n = \pi n u_n, \quad C_n &= \frac{\sqrt{2}}{b |J_2(z_n)|}; \quad \int_0^b \chi_n^w(y, \tau)^* \chi_m^w(y, \tau) dy = \delta_{mn}. \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

В выражении для нуля функции Бесселя мы выделили множитель  $\pi n$ , чтобы подчеркнуть сходство с уровнями исходной задачи (1.21). Близость  $u_n$  к 1 (таблица D.2) позволяет пользоваться для оценок простыми результатами (1.21). Эта близость означает, что собственные функции и собственные значения гамильтониана  $\hat{H}_1$  не слишком сильно отличаются от своих значений в исходной задаче (1.21).

Таблица D.2. Значения  $u_n - 1$  при разных  $n$ .

$n$	1	2	3	...	$n$
$u_n - 1$	0.22	0.116	0.08	...	$< (1/4n)$

Найденные состояния не совпадают прямо с состояниями исходного гамильтониана (1.20), (1.21), но являются их суперпозициями.

• **Возмущение.**

Заметим, что матричные элементы  $V_{nk}$  конечны, невзирая на множитель  $1/y^2$  в определении  $\hat{V}$ , поскольку  $\chi_n(y) \rightarrow Ay^{3/2}$  при  $y \rightarrow 0$ .

Основные черты решения хорошо видны в простейшем случае линейной зависимости  $\alpha(t) = 1 + \alpha'_t t$ , где  $\alpha'_t = (\alpha - 1)/T$ , когда интегрирование (D.6) даёт

$$\tau = \frac{1}{\alpha'_t} \left( 1 - \frac{1}{\alpha} \right) \Rightarrow \alpha = \frac{1}{1 - \alpha'_t \tau}, \quad \tau = \frac{t}{\alpha}. \quad (\text{D.9})$$

Теперь возмущение приобретает вид

$$\hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2my^2} \left[ \frac{1}{\alpha^2 \alpha'^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} - \frac{2}{\alpha \alpha'} \cdot \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{2y}{\alpha \alpha'} \cdot \frac{\partial^2}{\partial y \partial \tau} \right]. \quad (\text{D.10})$$

Далее мы обсудим, при каких условиях применима обычная теория возмущений, зависящих от времени § 16.3. Заметим для этого, что в матричном элементе  $W_{nm}^w$  оператор  $\partial/\partial \tau$  даёт множитель  $(E_n^w - E_m^w)/\hbar$ . Поэтому для соответствующего перехода параметр разложения есть  $\delta = (E_n^w - E_m^w)/(\hbar \alpha \alpha') \sim T_c/\tau_{nm}$  (при  $|\alpha(\alpha - 1)| \sim 1$  мы имеем  $T_c \sim T$ ). Теория возмущений работает при  $\delta \ll 1$ , т.е. в случае, когда время движения стенки  $T_c < \tau_{nm}$ . Такое условие может выполняться для уровней с небольшим  $n$ . Оно нарушается при очень больших  $n$ .

## Приложение E

### Классическое понимание спина фотона

Рассмотрим бесконечную циркулярно поляризованную плоскую волну в вакууме, её поле и плотность энергии имеют вид (ср. (14.12)):

$$\mathbf{E} = \frac{E_0}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y) e^{-i(\omega t - kz)}, \quad \mathbf{B} = \mp i\mathbf{E}, \quad w = \frac{|E_0|^2}{8\pi}. \quad (\text{E.1})$$

Естественно ожидать, что момент импульса такой волны определяется «направлением винта» поляризации, т. е. что этот момент направлен вдоль оси  $z$ . Но импульс поля направлен вдоль вектора  $\mathbf{k}$ , т. е. вдоль оси  $z$ , компонента момента импульса вдоль этой оси просто отсутствует, а других выделенных направлений в системе нет.

Положение меняется, если рассмотреть «почти идеально монохроматическую плоскую волну», ширина фронта которой  $L$  конечна, но много больше длины волны, а длина этого цуга волн ещё больше  $L$ . В этом случае при  $x, y \gg L$  поля просто нет, а при приближении к краям фронта величина поля уменьшается, т. е. приближение не зависящей от  $x, y$  амплитуды поля становится недостаточным, в (E.1) следует заменить  $E_0$  на  $E_0(x, y)$ , имея в виду, что изменение этой амплитуды поперек фронта — медленное,

$$\partial E_0(x, y)/\partial x \sim \partial E_0(x, y)/\partial y \sim E_0/L. \quad (\text{E.2})$$

Но изменяющаяся в поперечном направлении амплитуда в силу теорем Гаусса  $\text{div } \mathbf{E} = 0$  и  $\text{div } \mathbf{B} = 0$  означает, что «на краях фронта» поле поворачивается, нам достаточно рассмотреть только поворот амплитуды, не учитывая поворот направления распространения волны (этот малый эффект  $\sim \lambda/L$  не влияет на результат). Если рассмотреть теоремы Гаусса как уравнения для определения небольших

$z$ -компонент поля, то взамен (E.1) получается (с точностью  $\sim (\lambda/L)^2$ ):

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(x, y, z) &= \frac{e^{-i(\omega t - kz)}}{\sqrt{2}} [E_0(x, y)(\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y) + \\ &+ \frac{i}{k} \left( \frac{\partial E_0(x, y)}{\partial x} \pm i \frac{\partial E_0(x, y)}{\partial y} \right) \mathbf{e}_z], \quad (\text{E.3}) \\ \mathbf{B}(x, y, z) &= \mp i \mathbf{E}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}), \quad w = \frac{|E_0(x, y)|^2}{8\pi}. \end{aligned}$$

Теперь нетрудно вычислить усреднённую по времени плотность импульса электромагнитного поля  $\mathcal{P} = \frac{1}{8\pi c} \text{Re}[\mathbf{E} \times \mathbf{B}^*]$ . Прямое вычисление по получившимся формулам даёт

$$\mathcal{P} = \frac{1}{8\pi c} \left[ E_0^2(x, y) \mathbf{e}_z \mp \frac{1}{k} \frac{\partial E_0^2(x, y)}{\partial x} \mathbf{e}_y \pm \frac{1}{k} \frac{\partial E_0^2(x, y)}{\partial y} \mathbf{e}_x \right]. \quad (\text{E.4})$$

Таким образом, в главном приближении импульс поля по-прежнему связан с его плотностью энергии соотношением  $\mathcal{P} = (\mathbf{k}/ck)w$ . Отклонения от этого равенства свидетельствуют об отклонении направления волны от оси  $z$  на её периферии.

Вычислим теперь плотность  $z$ -компоненты момента импульса волны (напомним, что  $\mathbf{r} = x\mathbf{e}_x + y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z$ )

$$\mathcal{L}_{dz} = [\mathbf{r} \times \mathcal{P}] = \mp \frac{1}{8\pi ck} \left( x \frac{\partial E_0^2(x, y)}{\partial x} + y \frac{\partial E_0^2(x, y)}{\partial y} \right) \equiv \mp \frac{1}{8\pi ck} (\mathbf{r} \nabla E_0^2(x, y)).$$

Эта величина зависит от выбора начала отсчёта.

Полное же значение этой компоненты, проинтегрированное по всему объёму, не зависит от начала отсчёта. Действительно, при интегрирования по частям поверхностный интеграл обращается в нуль, поскольку поле исчезает на больших поперечных расстояниях, и

$$\mathcal{L}_z = \mp \frac{1}{8\pi ck} \int d^3x (\mathbf{r} \nabla E_0^2(x, y)) = \pm \frac{1}{\omega} \int d^3x \frac{E_0^2(x, y)}{8\pi} \equiv \pm \frac{W}{\omega}. \quad (\text{E.5})$$

Итак, отношение полного момента импульса поля к его полной энергии  $W$  составляет (в зависимости от знака циркулярной поляризации)  $\pm(1/\omega)$ . Считая свет набором фотонов с энергией  $\hbar\omega$ , мы видим, что естественно приписать каждому из них момент импульса  $\pm\hbar$ .

## Приложение F

### Некоторые дополнения

В этом приложении собраны поучительные решения разных квантово-механических задач, иллюстрирующие и дополняющие отдельные разделы основного текста.

#### § F.1. Замечание о степенном потенциале

Обсудим случай, когда потенциал осциллятора с кубической и четвертичной нелинейностями (5.10) описывает физическую ситуацию вплоть до очень больших значений  $x$ . При этом появляются физические явления, далекие от предсказаний теории возмущений (будем говорить для определённости о случае  $A > 0$ ). Некоторые авторы смело используют такие явления для спекуляций в задачах космологии.

В частности, при  $B = 0$  и при больших отрицательных  $x$  потенциал становится отрицательным. Значит, частица может туннелировать сквозь барьер, и состояния становятся нестабильными (см. § F.2.2), система не имеет стационарных уровней энергии.

При  $B > 0$  полный потенциал может иметь второй минимум при больших отрицательных  $x$ , возникает сильно несимметричная двойная яма, и в общем случае частица с энергией  $\hbar\omega(n + 1/2)$  некоторую часть времени проводит в новой «левой яме», и есть ещё новые стационарные состояния, почти не задерживающиеся в основной яме. Если же ещё окажется, что какие-то уровни обеих ям совпали, между ними возможны биения с очень большим периодом  $\sim (2\pi/\omega) \cdot (1/D^2)$ , где  $D$  — коэффициент туннелирования, который при наших условиях — очень маленькая величина.

Результаты теории возмущений для малых  $n$  имеют смысл для этих задач *при описании явлений в течение не слишком большого времени*  $\ll (2\pi/\omega) \cdot (1/D)$  (см. решение задачи 6.6 h).

## § F.2. Квазистационарные состояния в разных подходах

В § 2.8 мы построили общее описание квазистационарных состояний и проиллюстрировали его на простом примере движения на полупрямой  $x > 0$  с  $\delta$ -барьером, расположенным на некотором расстоянии от точки  $x = 0$  (простейшая грубая модель атомного ядра) § 2.8.1. Основные элементы общей картины воспроизводятся и в других примерах и для гладких потенциалов в квазиклассическом приближении. Детали могут быть интересны в некоторых приложениях.

### F.2.1. Квазистационарные состояния на паре $\delta$ -пиков.

Рассмотрим задачу рассеяния на потенциале, представляющем собой пару  $\delta$ -пиков, как в разд. 2.6.3 (только с отрицательными  $G_i$ ). Мы обсудим подробно случай одинаковых барьеров, когда  $G_1 = G_2 \equiv G$ .

Амплитуда рассеяния определяется значением коэффициента  $A_1(\varkappa)$  (2.27), вычисленным для  $\varkappa \rightarrow -ik$ ,  $g_0 = -mG/\hbar^2$ . После замен  $-2g_0a = b$  и  $2ka = u$  получающееся выражение для коэффициента прохождения  $T$  принимает вид

$$T = \left| \frac{A}{A_1} \right|^2 \equiv |1 + if(k, k)|^2 = \frac{1}{|1 + 2ib/u - (b/u)^2(1 - e^{2iu})|^2}. \quad (\text{F.1})$$

Мы разберём только случай не слишком большой энергии частицы,

$$k/|g_0| \ll 1 \Rightarrow u/b \ll 1. \quad (\text{F.2})$$

(Для барьеров конечной, но не очень большой ширины это — случай, когда энергия частицы ниже ширины барьера.)

•*Рассеяние.* Нетрудно видеть, что при почти любой энергии (F.2) коэффициент прохождения очень мал,  $T \sim (u/b)^4$  — рассеиватель почти непрозрачен. Однако, при приближении величины  $u$  к значениям  $\pi n$  (целое число полуволн между барьерами) выражение в скобках (F.1) приближается к нулю, и коэффициент прохождения увеличивается, при  $u = \pi n$  прохождение усиливается,  $T \sim (u/b)^2$ .

Действительная ситуация более благоприятна. При небольшом отклонении  $u$  от  $\pi n$  в игру вступает комплексность выражения в скобках, и для некоторых энергий получается  $T = 1$  — полная прозрачность. Найдём эти значения энергии.

Обозначим через  $E_{n0} = (\pi\hbar n)^2/(8ma^2)$  энергию, отвечающую целому числу полувольт,  $u = \pi n$ . Небольшому изменению энергии  $E \rightarrow E_{n0}(1 - \delta_n)$  отвечает небольшое изменение  $u \rightarrow \pi n(1 - \delta_n/2)$ . Рассмотрим коэффициент прохождения (F.1) при таком изменении, ограничившись учётом поправок первого порядка по  $\delta_n$ :

$$T = \frac{1}{|1 + 2ib/(\pi n) + (b/\pi n)^2 (e^{-i\pi n\delta_n} - 1)|^2} \approx \frac{1}{|1 + 2ib/(\pi n) - (b/\pi n)^2 \cdot i\pi n\delta_n|^2} = \frac{1}{|1 + ib(2 - b\delta_n)/(\pi n)|^2}.$$

(Мы записали  $e^{i\alpha} \approx 1 + i\alpha$ , где  $\alpha = -\pi n\delta_n$ ).

Мы видим, что коэффициент прохождения равен 1 (имеет место полная прозрачность) при  $\delta_n = 2/b$ , т. е. при энергии

$$E_n^r = E_{n0}(1 - 2/b). \quad (\text{F.3})$$

Для достижения этой прозрачности оказалось необходимым, чтобы между барьерами уложилось почти точно целое число полувольт — как в бесконечно глубокой прямоугольной яме. Небольшое отклонение от целочисленности обусловлено туннелированием сквозь барьер. (Тот факт, что относительная величина этого отклонения одинакова для всех значений  $n$ , кажется случайным свойством данного примера.)

Простая сшивку, начинающаяся с прошедшей волны, показывает, что амплитуда волны между барьерами — того же порядка, что и амплитуда прошедшей волны. Вне области прозрачности эта амплитуда мала. В области прозрачности амплитуда резонансно усиливается.

• *Квазистационарные состояния* формально можно определить как состояния, в которых после рассеивателя проходящей волны нет, т. е.  $A_1(-ik) = 0 \Rightarrow (1 + if(k, k))^{-1} = 0$ . Они могут реализовываться только при комплексных значениях энергии, т. е. отвечают волновым пакетам. С учётом (F.1) условие  $A_1(-ik) = 0$  удобно записать в виде

$$(u/b)^2 + 2ib/u = 1 - e^{2iu}. \quad (\text{F.4})$$

Мы решаем это уравнение при тех же условиях (F.2) и тем же методом, что и выше, записав теперь для энергии квазиуровня  $E_n^q$  и получающейся из неё величины  $u$  разложения с учётом мнимой части

$$E_n^q = E_{n0}(1 - \delta_n - i\gamma_n) \rightarrow u = \pi n(1 - \delta_n/2 - i\gamma_n/2)$$

При приближённом решении этого уравнения надо иметь в виду, что параметром малости задачи является величина  $\rho = u/b \sim \pi n/b$ . Левая часть (F.4) мала, и в ней можно отбросить поправки  $\delta_n$  и  $\gamma_n$ . Первое (действительное) слагаемое получившегося выражения — величина порядка  $\rho^2$ , а второе (мнимое) слагаемое — порядка  $\rho$ . Если удержать в правой части только первый член разложения экспоненты в ряд, то приравнивая по отдельности действительные и мнимые части, мы получаем, что величина  $\delta_n = 2/b$ , как и выше.

А вот поправка  $\gamma_n$  — второго порядка по  $\rho$ . Значит, для получения правильного значения  $\gamma$  экспоненту надо разложить с точностью до второго порядка по  $\delta_n$ , что даёт для действительной части  $(1 - e^{2iu})$  выражение  $-\pi n(\gamma_n - \pi n \delta_n^2/2)$ . Подставляя полученное значение  $\delta_n$ , найдём, что  $\gamma_n = \pi n/(2b^2)$  и

$$E_n^q = E_{n0}(1 - 2/b) - i\Gamma_n/2, \quad \Gamma_n = 2E_{n0}\pi n/b^2. \quad (\text{F.5})$$

Таким образом, положения квазиуровней близки к положениям уровней бесконечно глубокой прямоугольной ямы, ширины  $\Gamma_n$  растут, а «добротности»  $E_n/\Gamma_n$  падают с ростом энергии уровня. Полученная ширина уровня характеризует также ширину энергетической полосы прозрачности в задаче рассеяния.

Нетрудно убедиться, что полуклассическая оценка вида (2.52) имеет место и в этом случае. Стоит только вспомнить, что в этом случае классический период движения между барьерами

$$T_{\text{кл}} = 4ma/(\hbar k) = 8ma^2/(\hbar u) \approx 8ma^2/(\hbar \pi n),$$

а  $D = (2k/g)^2 \equiv (\pi n/b)^2$  — коэффициент туннелирования через барьер (2.37b), и частица уходит из ямы дважды за период — налево и направо.

С ростом  $n$  абсолютная величина поправок возрастает, и простое разложение экспоненты в правой части (F.4) перестаёт работать. Тем не менее, легко увидеть, что — в отличие от бесконечно глубокой ямы — уровни кончаются при  $n_{\text{max}} \sim b/\pi$ .

◇ Формулы (2.27) позволяют обсудить и более общий случай барьеров разной высоты. В этом случае изложенные выше результаты легко воспроизводятся, с очень простыми модификациями. Стоит заметить только, что потоки уходящих из квазистационарного состояния в разные стороны частиц разные, они относятся, как соответствующие коэффициенты туннелирования.

### F.2.2. Квазистационарные состояния в квазиклассическом приближении

Рассмотрим частицу в поле рис. 16 — это полный аналог задачи о  $\delta$ -барьере на полупрямой разд. 2.8.1 со сходным результатом.

$U(x)$

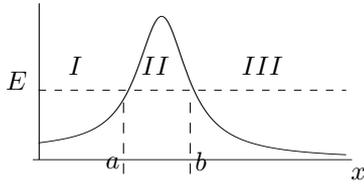


Рис. 16

Если бы потенциал после максимума не убывал с ростом  $x$ , частица имела бы 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 (тун-

нелирование) 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 определения, введённые в § 2.8.

В нашей задаче условие невозрастания вероятности со временем выглядит как требование, чтобы на больших расстояниях оставалась только уходящая из центра волна (при этом вероятность убывает со временем).

Последовательное применение условий сшивки (6.13) (как при квантовании) даёт с использованием обозначений (6.16) и

$$\varphi = \int_0^a k dx + \pi/4, \quad \alpha_r = \int_b^x k dx + \pi/4, \quad z_\ell = \int_a^x \varkappa dx, \quad z_r = \int_x^b \varkappa dx$$

(значки  $\ell$  и  $r$  означают отсчёт от левого и правого края интервала соответственно)

$$\psi(x) = \left\{ \begin{array}{l} \frac{A}{\sqrt{k}} \sin \left( \int_0^x k dx \right), \quad (I) \\ \frac{A}{\sqrt{\varkappa}} \left[ \sin \varphi \cdot e^{z_\ell} - \frac{\cos \varphi}{2} \cdot e^{-z_\ell} \right] = \\ = \frac{A}{\sqrt{D\varkappa}} \left[ \sin \varphi \cdot e^{-z_r} - D \frac{\cos \varphi}{2} e^{z_r} \right], \quad (II) \\ \frac{A}{\sqrt{Dk}} \left[ 2 \sin \varphi \cdot \sin \alpha_r - D \frac{\cos \varphi}{2} \cdot \cos \alpha_r \right]. \quad (III) \end{array} \right\} \quad (F.6)$$

Условие, чтобы в области III была только уходящая волна  $e^{i\alpha r}$ , даёт уравнение (далее мы считаем туннелирование слабым, т. е.  $D \ll 1$ ):

$$\frac{2 \sin \varphi}{-(D \cos \varphi)/2} = i \Rightarrow \operatorname{tg} \varphi = -iD/4. \quad (\text{F.7})$$

При  $b \rightarrow \infty$  было бы  $D = 0$ , и в системе нашлись бы стационарные состояния с энергиями  $E = E_n$ , которые изучались в § 6.4. При  $D \neq 0$  движение инфинитно, т. е. локализуемых стационарных состояний нет. Однако физическая ситуация при  $D \ll 1$  не может сильно измениться по сравнению со случаем  $D = 0$ , и решения уравнения (F.7) должны лишь ненамного отличаться от решений условий квантования  $\varphi = \pi(n + 1)$  (6.15). Поэтому запишем  $\varphi = \pi(n + 1) + \delta_n$ , где  $|\delta_n| \ll 1$ . Тогда уравнение (F.7) преобразуется к виду

$$-iD/4 = \operatorname{tg} \delta_n \approx \delta_n \Rightarrow \varphi = \pi(n + 1) - iD/4.$$

Окончательно, выражая величины  $\varphi$  и  $k$  (6.5) через комплексную энергию состояния  $\tilde{E}_n = E_n - i\Gamma_n/2$ , получаем

$$\int_o^a \sqrt{2m(E_n - i\Gamma_n/2 - U(x))} dx = \pi \hbar (n + 3/4) - i \hbar D_n/4.$$

Вычитая это выражение из (6.15), получим с учётом (6.9) и малости  $\Gamma_n \ll E_n$

$$\begin{aligned} i \frac{\hbar D_n}{4} &= \int_o^a \sqrt{2m(E_n - U(x))} dx - \int_o^a \sqrt{2m(E_n - i \frac{\Gamma_n}{2} - U(x))} dx = \\ &= \frac{1}{4} \hbar \frac{d\varphi}{dE} i \Gamma_n = \frac{i \Gamma_n}{4} \cdot T_{\text{кл}}, \end{aligned}$$

т. е. время жизни  $\tau$  оказалось равным классическому периоду  $T_{\text{кл}}$ , делённому на вероятность  $D_n$  ухода через барьер при однократном подходе к барьеру (2.52) — в точном подобии тому, как это было для прохождения  $\delta$ -пики ((6.10)). Естественным образом оказалось, что ширина уровня значительно меньше расстояния между уровнями исходной стационарной задачи.

### § F.3. Двойная яма. Квазиклассическое приближение

В этом разделе мы рассмотрим состояния частицы в двойной почти симметричной яме. Получаемые здесь результаты фактически воспроизводят то, что получилось при изучении пары  $\delta$ -ям в разд. 2.6.3.

Пусть  $U(x)$  имеет вид пары очень немного различающихся потенциальных ям  $A$  и  $B$ , разделённых умеренно высоким барьером (рис. 17). Если бы барьер был непроницаем (бесконечно высок), то существовали бы состояния  $\psi_{0A}(x)$  и  $\psi_{0B}(x)$  с энергиями  $E_{0A} \approx E_{0B}$  и периодами классического движения  $T_{\text{кл},0A}$  и  $T_{\text{кл},0B}$ , отвечающие движению частицы в одной из ям. Предполагается, что разность энергий  $|E_{0A} - E_{0B}|$  мала по сравнению с расстоянием до следующего уровня в каждой из «родительских» ям (6.10). Чтобы не загромождать изложение, мы считаем периоды классического движения  $T_{\text{кл},0A}$  и  $T_{\text{кл},0B}$  одинаковыми.

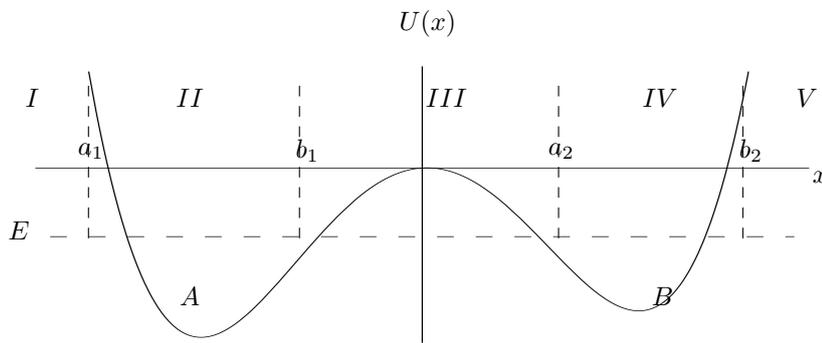


Рис. 17. Двойная яма

Рассмотрим эту задачу в полной аналогии с предыдущими, используя правила шивки (6.13). 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. Вслед за этим обозначим текущие значения показателей квазиклассических экспонент, отсчитываемых от левой ( $\ell$ ) и правой ( $r$ ) точек поворота в каждой из областей  $\alpha_{i\ell}$ ,  $\alpha_{ir}$ ,  $t_\ell$ ,  $t_r$ . Обозначим также

через  $\phi_A$  и  $\phi_B$  полные изменения квазиклассических фаз между точками поворота и через  $D$  — обычный коэффициент туннелирования между ямами:

$$\begin{aligned} \alpha_{1\ell} &= \int_{a_1}^x k(x)dx + \frac{\pi}{4}, & \alpha_{1r} &= \int_x^{b_1} k(x)dx + \frac{\pi}{4}, & \phi_A &= \int_{a_1}^{b_1} k(x)dx + \frac{\pi}{2}, \\ \alpha_{2\ell} &= \int_{a_2}^x k(x)dx + \frac{\pi}{4}, & \alpha_{2r} &= \int_x^{b_2} k(x)dx + \frac{\pi}{4}, & \phi_B &= \int_{a_2}^{b_2} k(x)dx + \frac{\pi}{2}; \\ t_\ell &= \int_{b_1}^x \varkappa(x)dx, & t_r &= \int_x^{a_2} \varkappa(x)dx, \\ D &= \exp\left(-2 \int_{b_1}^{a_2} \varkappa(x)dx\right), & G(x) &= \exp\left(\int_{b_2}^x \varkappa(x)dx\right). \end{aligned}$$

В этих обозначениях переход в отсчёте от левой точки поворота к правой описывается равенствами:  $\alpha_{1r} = \phi_A - \alpha_{1\ell}$ ,  $\alpha_{2r} = \phi_B - \alpha_{2\ell}$ ,  $e^{-t_\ell} = \sqrt{D}e^{t_r}$ .

Построим теперь выражения для волновой функции в каждой из областей, стартуя с области I, где — в силу требования нормируемости — волновая функция исчезает при  $x \rightarrow -\infty$ .

$$\begin{aligned} \psi &= (I) : && \frac{A}{2\sqrt{\varkappa}} e^{-\int_x^{a_1} \varkappa(x)dx} \Rightarrow \\ (II) : &&& \Rightarrow \frac{A}{\sqrt{k}} \sin \alpha_{1\ell} = \frac{A}{\sqrt{k}} \sin(\phi_A - \alpha_{1r}) = \\ &&& = \frac{A}{\sqrt{k}} (\sin \phi_A \cos \alpha_{1r} - \cos \phi_A \sin \alpha_{1r}) \Rightarrow \\ (III) &&& : \Rightarrow \frac{A}{\sqrt{\varkappa}} \left( \sin \phi_A e^{t_\ell} - \frac{1}{2} \cos \phi_A e^{-t_\ell} \right) = \\ &&& = \frac{A}{\sqrt{D\varkappa}} \left( \sin \phi_A e^{-t_r} - \frac{D}{2} \cos \phi_A e^{t_r} \right) \Rightarrow \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(IV) : & \Rightarrow \frac{A}{\sqrt{Dk}} \left[ 2 \sin \phi_A \sin \alpha_{2l} - \frac{D}{2} \cos \phi_A \cos \alpha_{2l} \right] = \\
& = \frac{A}{\sqrt{Dk}} \left[ 2 \sin \phi_A \sin(\phi_B - \alpha_{2r}) - \frac{D}{2} \cos \phi_A \cos(\phi_B - \alpha_{2r}) \right] = \\
& = \frac{A}{\sqrt{2Dk}} [(4 \sin \phi_A \sin \phi_B - D \cos \phi_A \cos \phi_B) \cos \alpha_{2r} - \\
& - (4 \sin \phi_A \cos \phi_B + D \cos \phi_A \sin \phi_B) \sin \alpha_{2r}] \Rightarrow \\
(V) : & \Rightarrow \frac{A}{\sqrt{x}} [(4 \sin \phi_A \sin \phi_B - D \cos \phi_A \cos \phi_B) G(x) - \\
& - \frac{4 \sin \phi_A \cos \phi_B + D \cos \phi_A \sin \phi_B}{2G(x)}].
\end{aligned}$$

Значение энергии состояния определяется из требования обращения в нуль коэффициента при растущей вправо экспоненте  $G(x)$ ,

$$4 \sin \phi_A \sin \phi_B - D \cos \phi_A \cos \phi_B = 0. \quad (F.8)$$

Мы ищем значения энергии собственных состояний двойной ямы  $E$ , близкие к энергии состояния в уединённой яме  $E_o$ .

Перейдём к подробному рассмотрению.

• Разберём сначала случай **симметричной ямы**  $E_{0л} = E_{0п} \equiv E_o$ . В этом случае  $\phi_A = \phi_B = \phi$  и  $E = E_o + \Delta$ , где  $\Delta$  — малая добавка. Разлагая подынтегральное выражение в величине  $\phi$  по малой добавке  $\Delta$  с помощью (6.9), получаем

$$\phi = \phi_o + \frac{T\Delta}{2\hbar}.$$

Здесь  $\phi_o$  — значение величины  $\phi$  при  $E = E_o$ , а  $T$  — период колебаний частицы в уединённой яме, например, левой. При этом согласно правилу квантования (6.7)  $\sin \phi_o = 0$ ,  $\cos \phi \approx \cos \phi_o \approx \pm 1$ . Таким образом, мы получаем уравнение

$$\left( \frac{T\Delta}{2\hbar} \right)^2 = \frac{D}{4} \Rightarrow \Delta = \pm \Delta_s, \quad \text{где } \Delta_s = \sqrt{D} \frac{\hbar}{T}. \quad (F.9)$$

Итак, уровень расщепился на два, и расщепление энергий  $\Delta_s$  в  $\sqrt{D}$  раз меньше расстояния между уровнями уединённой ямы.

• **Небольшое отклонение от симметрии.** Рассмотрим теперь случай небольшого отклонения от симметрии, когда уединённые ямы

близки по форме друг к другу, но их энергии отличаются друг от друга меньше, чем расстояние между уровнями внутри каждой из ям  $\hbar/T$ . (Мы пренебрегаем различием периодов классического движения в каждой из ям  $T_A$  и  $T_B$ , полагая<sup>1</sup>  $T_A \approx T_B = T$ .)

$$E_{0A} = E_o - \delta, \quad E_{0B} = E_o + \delta, \quad \delta \ll \hbar/T. \quad (\text{F.10})$$

Обозначая через  $\Delta$  отклонение истинной энергии от усреднённой энергии уединённых ям  $E_o$  и через  $\Delta_S$  величину расщепления для симметричной ямы (F.9), найдем из (F.8) точно так же, как и выше

$$\frac{(\Delta - \delta)T}{2\hbar} \cdot \frac{(\Delta + \delta)T}{2\hbar} = \frac{D}{4} \Rightarrow \Delta = \pm \sqrt{\delta^2 + \Delta_S^2}. \quad (\text{F.11})$$

Итак, расщепление термов близко к тому, что было в симметричном случае, если расщепление исходных термов  $\delta$  меньше того, которое даётся туннелированием,  $\delta < \Delta_S$ . Наоборот, если  $\Delta_S < \delta$ , туннелирование почти не меняет уровней.

Сравним вероятности пребывания частицы в ямах  $A$  и  $B$  для полученных состояний. Заметим, что значения  $\sin \phi_A$  и  $\sin \phi_B$  могут быть очень разными (хотя и малыми), а вот  $\cos \phi_A \approx \cos \phi_B \approx 1$ . Идея вычисления та же, что и при получении нормировки для квазиклассической волновой функции (6.8).

Использование для волновой функции в области  $II$  первого из выписанных выше (F.8) выражений даёт вероятность пребывания в яме  $A$ , равную  $w_A = A^2 T_A (\hbar/4m)$ . Вероятность пребывания в яме  $B$  вычисляется из первого выражения для области  $IV$ , что даёт  $w_B = A^2 T_B (\hbar/4m) [(4/D) \sin^2 \phi_A + (D/4) \cos^2 \phi_A]$ . Используя (F.8) и отбрасывая второе слагаемое в квадратных скобках в силу условия  $D \ll 1$ , найдём

$$w_B/w_A = (T_B/T_A) (\sin \phi_A / \sin \phi_B) \approx \sin \phi_A / \sin \phi_B. \quad (\text{F.12})$$

Из (F.11) легко получается, что

$$\text{При } \Delta > 0 \quad \frac{\sin \phi_A}{\sin \phi_B} = \frac{\Delta - \delta}{\Delta + \delta}, \quad \text{при } \Delta < 0 \quad \frac{\sin \phi_A}{\sin \phi_B} = \frac{|\Delta| + \delta}{|\Delta| - \delta}. \quad (\text{F.13})$$

<sup>1</sup>Учёт отличия  $T_A$  от  $T_B$  сводится к простой замене  $T \rightarrow \sqrt{T_A T_B}$  в полученных результатах. В таком виде результат описывает и случай сильно несимметричной ямы в ситуации, когда некоторые из уровней «родительских» ям «справа» и «слева» оказались близки друг к другу.

Качественная картина явления в точности совпадает с той, что описана для пары  $\delta$ -ям, см. стр. 78. Коротко говоря, если исходные ямы немного различались, 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, возникают биения между двумя ямами.

#### § F.4. 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 отражённая волна небольшой амплитуды. Это явление называют надбарьерным отражением.

Для решения задачи о распространении волны в случае, когда  $E > U(x)$  при всех действительных  $x$  мы воспользуемся квазиклассическим подходом. Перейдём в плоскость **комплексной переменной**  $x$  (см. § B.8). Если потенциал  $U(x)$  — аналитическая функция  $x$ , отличная от константы, то уравнение  $E = U(x)$ , не имея решений на действительной оси, имеет только пары комплексно сопряжённых решений, отвечающих *комплексным точкам поворота*  $x_{i\pm}^E = \phi_i \pm i\beta_i$ . Если энергия  $E$  очень велика, то уравнение для точки поворота имеет решения только вблизи особенностей потенциала (где  $U(x) = \infty$ ) с координатами  $x_{i\pm}^V = a_i \pm ib_i$ . При умеренно больших энергиях расстояние между точками  $x_{i\pm}^V$  и  $x_{i\pm}^E$  не очень мало.

Пусть в верхней полуплоскости есть лишь одна комплексная точка поворота  $x_{0+}^E = \phi_o + i\beta_o$ . 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  $x_o$  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. даёт отражённую волну

$$\psi_{\text{отр}} = \frac{1}{\sqrt{k}} e^{-i \int_{x_1}^x k(x) dx + i \int_C k(x) dx}, \text{ что отвечает коэффициенту отражения}$$

$$R = |\psi_{\text{отр}}/\psi_{\text{пр}}|^2 = e^{-2\text{Im} \int_C k dx}.$$

Чтобы вычислить контурный интеграл в показателе, продолжим контур по действительной оси до точки  $x_\ell = \phi - \varepsilon$ , затем направим его вверх, обогнём сверху точку ветвления  $x_o = \alpha_o + i\beta_o$  по окружности малого радиуса  $\varepsilon$ , 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 её вклад в искомую мнимую часть обращается в ноль. В итоге при  $\varepsilon \rightarrow 0$  наш интеграл обращается в удвоенный интеграл по пути от  $x_1 = \alpha_o$  до  $x_o = \alpha_o + i\beta_o$ ,

$$R = e^{-4\sigma}, \quad \sigma = \text{Im} \int_{x_1}^{x_o} k(x) dx. \quad (\text{F.14})$$

◇ При очень больших энергиях положения особенностей  $x_{i\pm}^V$  и  $x_{i\pm}^E$  очень близки друг к другу. Общее решение для этого случая автору не известно.

## § F.5. Уровни Ландау в цилиндрических координатах

В дополнение к изложению в разд. 11.4.3, рассмотрим движение электрона в однородном магнитном поле  $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ , используя векторный потенциал в калибровке, сохраняющей цилиндрическую симметрию задачи  $\mathbf{A} = -[\mathbf{B} \times \mathbf{r}]/2$  [1]. Тут естественно использовать цилиндрические координаты, в которых  $\mathbf{A} = (A_\rho, A_\varphi, A_z) \equiv (0, B\rho/2, 0)$  и выполнить разделение переменных  $\psi = e^{im\varphi + ip_z z/\hbar} R(\rho)$ . Тогда уравнение Шредингера для функции  $R(\rho)$  принимает вид (здесь мы обо-

значаем массу электрона через  $\mu$  и не выписываем спиновый вклад)

$$R'' + \frac{1}{\rho}R' - \frac{m^2}{\rho^2}R + \left[ \frac{2\mu E - p_z^2}{\hbar^2} - \frac{m\mu\omega_B}{\hbar} - \left( \frac{\mu\omega_B}{2\hbar} \rho \right)^2 \right] R = 0.$$

Обозначив  $\beta = (E - p_z^2/2\mu)/(\hbar\omega_B) - m/2$  и введя переменную  $\xi = (\mu\omega_B\rho/(2\hbar))^2$ , 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  $R(\xi) = e^{-\xi/2}\xi^{|m|/2}w(\xi)$ . Для функции  $w(\xi)$  получается уравнение, которое решается с помощью разложения в ряд по той же схеме, которая была использована в § 9.3 для атома водорода. При произвольном значении  $\beta$  волновая функция растёт 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

$$E = \hbar\omega_B \left( n_\rho + \frac{|m| + m + 1}{2} + \sigma_z \right) + \frac{p_z^2}{2\mu}. \quad (\text{F.15})$$

Это — иная форма записи полученного ранее ответа (11.17). Здесь обсуждавшееся в разд. 11.4.2 вырождение выглядит как независимость энергии от  $m$  для  $m < 0$  или как независимость от  $m$  при фиксированной величине  $n_\rho + m$  для  $m > 0$ . Преимущество использования этой калибровки (с существенно более громоздкими вычислениями) — в том, что здесь явно фиксируется цилиндрическая симметрия задачи, и в ответ входят проекции момента импульса на поле.

## § F.6. Тонкая структура уровней атома водорода

Тонкая структура уровней атома водорода имеет специальные черты. Чтобы изучить её, 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

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_0 + \hat{V}_{\text{rel}} + \hat{V}_{fs} + \hat{V}_D, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}, \quad \hat{V}_{\text{rel}} = -\frac{((\hat{\mathbf{p}})^2)^2}{8m^2c^3}, \\ \hat{V}_{fs} &= \frac{1}{2} \left(\frac{a_B}{r}\right)^3 \alpha^2 \text{Ry} \cdot (\boldsymbol{\ell} \mathbf{s}), \quad \hat{V}_D = \frac{\pi}{2} \alpha^2 \text{Ry} \cdot a_B^3 \delta(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (\text{F.16})$$

Мы рассматриваем слагаемые  $\hat{V}_i$  как возмущения. Слагаемое  $\hat{V}_{fs}$  — обсуждавшееся выше спин–орбитальное взаимодействие с аккуратно вычисленным коэффициентом. Слагаемое  $\hat{V}_{\text{rel}}$  — обычная поправка в разложении кинетической энергии  $\epsilon = \sqrt{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2} - mc^2$  по  $(v/c)$  (9.23). Появление слагаемого  $\hat{V}_D$  (его обнаружил *Дарвин*) обусловлено тем, что — в силу соотношения неопределённостей — электрон нельзя локализовать лучше, чем его комптоновский размер  $\hbar/(mc)$ .

**Поправка** к энергии уровней, **обусловленная слагаемым  $\hat{V}_{\text{rel}}$**  обеспечивает небольшое разрушение вырождения по  $\ell$  при фиксированном  $n$ . Она вычислена в (9.23b):

$$\Delta E_{\text{rel}} = -\frac{\alpha^2 \text{Ry}}{n^3} \left( \frac{1}{\ell + 1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (\text{F.17a})$$

**Дарвиновская поправка** к энергии:

$$\Delta E_D = \langle njl | \hat{V}_D | njl \rangle = \frac{\pi}{2} \alpha^2 \text{Ry} a_B^3 \langle njl | \delta(\mathbf{r}) | njl \rangle = \frac{\pi}{2} \alpha^2 \text{Ry} a_B^3 |\psi_{n,\ell m}(0)|^2 \delta_{\ell 0}.$$

Эта величина содержит квадрат волновой функции при  $\mathbf{r} = 0$ , который отличен от нуля только при  $\ell = 0$  (напомним, что для  $\ell \neq 0$  при малых  $r$  радиальная волновая функция убывает как  $r^\ell$  (9.7)). При этом  $\psi_{n,\ell=0} = R_{n,\ell=0}/\sqrt{4\pi}$ . Используя (9.17b), мы получаем

$$a_B^3 |\psi_{n0}|^2(0) = \frac{1}{\pi n^3} \delta_{\ell 0} \Rightarrow \Delta E_D = \frac{\alpha^2 \text{Ry}}{2n^3} \delta_{\ell 0}. \quad (\text{F.17b})$$

**Спин–орбитальная поправка** к энергии:

$$\begin{aligned}\Delta E_{fs} &= \frac{\alpha^2}{2} \text{Ry} \left\langle njl \left| \frac{(\boldsymbol{\ell} \mathbf{s}) a_B^3}{r^3} \right| njl \right\rangle = \\ &= \frac{\alpha^2}{2} \text{Ry} \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - 3/4}{2} \left\langle njl \left| \frac{a_B^3}{r^3} \right| njl \right\rangle.\end{aligned}$$

При  $\ell = 0$  среднее значение  $\langle |(\ell \mathbf{s})| \rangle$  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 (9.7)). Используя для этого среднего результат (B.26), найдём

$$\Delta E_{fs} = \frac{\alpha^2 \text{Ry}}{4n^3} \frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - 3/4}{(\ell+1/2)\ell(\ell+1)} (1 - \delta_{\ell 0}). \quad (\text{F.17c})$$

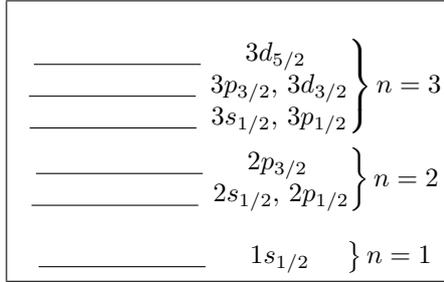


Рис. 18. Термы атома водорода

двукратное вырождение по ориентации спина при заданном значении полного момента  $j$ :

$$E_{nj\ell} = -\frac{\text{Ry}}{n^2} - \frac{\alpha^2 \text{Ry}}{n^3} \left( \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right). \quad (\text{F.18})$$

На рис. 18 изображена получившаяся схема уровней тонкой структуры.

◇ Обнаруженное двукратное вырождение отсутствует у атомов с несколькими электронами, где уже состояния невозмущённого гамильтониана  $\hat{H}_0$  при разных  $\ell$  и одинаковом  $n$  имеют разные энергии. Для таких атомов релятивистское слагаемое  $\hat{V}_{\text{rel}}$  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 обычно не учитываются. По той же причине для многоэлектронных атомов обычно не изучается зависимость среднего  $\langle |1/r^3| \rangle$  от  $\ell$ .

**Лэмбовский сдвиг.** Вырождение, показанное на рис. 18, снимается очень слабым *Лэмбовским расщеплением*, которое обусловлено взаимодействием электрона с вакуумными флуктуациями электромагнитного поля и «виртуальным» (на очень короткое время, допускаемое

Полная поправка второго порядка по  $(v/c) \sim \alpha$  к энергии уровня атома водорода складывается из найденных вкладов (F.17):  $\Delta E = \Delta E_{\text{rel}} + \Delta E_{fs} + \Delta E_D$ . 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 учётом этой поправки сохраняет

соотношением неопределённостей) рождением электрон-позитронных пар. Точный расчёт, 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  $ns_{1/2}$  (F.18) увеличивается на величину

$$\delta E_{n,\ell=0}^L = \frac{16\alpha^3}{3\pi n^3} \left[ \ln \frac{1}{\alpha} + R_n \right] \text{Ry}, \quad R_n \sim 1. \quad (\text{F.19})$$

Лэмбовский сдвиг уровней с  $\ell \neq 0$  значительно меньше, помимо общей зависимости  $16\alpha^3/(3\pi n^3)$ , этот сдвиг зависит от  $\ell$  и  $j$ , но не содержит большого усиливающего слагаемого  $\ln(1/\alpha) \approx 4,9$ . В частности, для уровня  $2s_{1/2}$  величина  $R_2 = -1,089$ . 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.

## Приложение G

# Фундаментальные частицы и взаимодействия. Что дальше

### § G.1. О релятивистской квантовой теории. Античастицы

Перечислим коротко, что нового появляется в релятивистской теории по сравнению с нерелятивистской, которая обсуждалась в книге.

- Уравнение Шредингера содержит вторую производную по координате и первую производную по времени. В соответствующем фундаментальном уравнении релятивистской теории степени производной по времени и по координате должны совпадать. На первый взгляд, релятивистское обобщение уравнения Шредингера должно содержать и вторую производную по времени, т. е. лапласиан  $\Delta = \sum \partial^2/\partial x_i^2$  должен замениться на даламбертиан  $\square = \sum \partial^2/\partial x_i^2 - (1/c^2)\partial^2/\partial t^2$ . Нетрудно указать процедуру предельного перехода, в которой обычное уравнение Шредингера оказывается нерелятивистским предельным случаем этого уравнения д'Аламбера. Но как быть с первым из постулатов квантовой механики — волновая функция **полностью** определяет состояние системы (включая её эволюцию)? Для уравнения 2-го порядка это неверно. Кажется, что нужно менять систему постулатов. Дирак придумал выход, не требующий такого изменения, вторая производная по времени в его подходе не возникает. Он сумел «извлечь корень» из оператора д'Аламбера, определив специальные  $4 \times 4$  матрицы  $\gamma^\alpha$  ( $\alpha = 0, 1, 2, 3$ ) со свойствами

$$\gamma^\alpha \gamma^\beta + \gamma^\beta \gamma^\alpha = 2g^{\alpha\beta} = 2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

(Тензор  $g^{\alpha\beta}$  называют метрическим тензором четырёхмерного пространства-времени. С помощью метрического тензора квадрат интервала — основного инварианта специальной теории относительности — записывается в виде  $ds^2 = \sum g^{\alpha\beta} dx_\alpha dx_\beta$ , где  $x_1, x_2, x_3$  — обычные пространственные координаты, а  $x_0 = ct$ .)

После этого потребовалось объявить волновую функцию четырёхкомпонентной (биспинором). Релятивистское обобщение уравнения Шредингера для биспиноров называют *уравнением Дирака*. Для движения в магнитном поле оно имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left\{ \gamma^0 \left[ \sum_{i=1-3} \gamma^i (cp_i - eA_i) + mc^2 \right] + e\phi \right\} \psi, \quad (\text{G.1})$$

где  $\psi$  — столбец-биспинор,  $\phi$  и  $\mathbf{A}$  — скалярный и векторный потенциалы электромагнитного поля (ср. § 11). В нерелятивистском пределе это уравнение переходит в соответствующее уравнение Шредингера (11.7). Пара компонент биспинора отвечает паре компонент обычного спинора (см. § 10.1) для частицы со спином  $1/2$ , а другая пара компонент той же волновой функции отвечает **античастице** с таким же по величине спином. Именно так спин *естественно* появляется в теории. Подобные биспиноры описывают состояния всех частиц со спином  $1/2$  — электронов, протонов, кварков и т. п. Но для частиц со спином 0 или 1 справедливо уравнение д'Аламбера, и решение проблемы начальных условий оказывается иным.

**Античастицу** можно уподобить шарикю от пинг-понга, помещённому в воду, или дырке в полупроводнике. Она имеет те же массу и спин, что и частица, но противоположный заряд (если он отличен от нуля). Обычно обозначают античастицу тем же значком, что и частицу, добавляя сверху горизонтальную черточку, например,  $\bar{f}$  это античастица частицы  $f$ . Перечисляя частицы, мы будем иногда ставить сверху значок, обозначающий их заряд в единицах заряда электрона. Так,  $e^-$  — обычный электрон  $e$ , а позитрон  $e^+ \equiv \bar{e}$  — его античастица. По определению, анти-античастица это и есть сама частица. Подчеркнём, что частица отличается от античастицы не только зарядом (античастица есть и у нейтрального нейтрона), взаимодействия даже нейтральных частиц и античастиц с другими частицами приводят к разным конечным состояниям. При столкновении частицы со своей античастицей  $f + \bar{f}$  они могут *аннигилировать*, превратив всю свою энергию покоя

$2m_f c^2$  в фотоны,  $\pi$ -мезоны или другие частицы. Для нейтральной частицы со спином  $1/2$  могут реализовываться две возможности, ведущие к различным физическим следствиям: 1) такая частица не совпадает со своей античастицей (Дираковский фермион); 2) такая частица совпадает со своей античастицей (Майорановский фермион). Понятие античастицы определяют и для частиц с целым спином. При этом антифотон это фотон,  $\bar{\gamma} = \gamma$ ,  $\bar{\pi}^\pm = \pi^\mp$  и  $\bar{\pi}^0 = \pi^0$ , но  $\bar{K}^0 \neq K^0$ .

- Релятивистские столкновения обычно неупругие, в них могут рождаться новые частицы. Поэтому обычная волновая функция не очень удобна. Для описания таких задач используется *метод вторичного квантования*, обсуждавшийся кратко в § 14.1.

- Возможность возникновения в процессе новых частиц делает фундаментальные уравнения релятивистской теории нелинейными. Ни для одной физически реализуемой системы точное решение такой задачи не найдено и, по-видимому, не существует. Единственно регулярным способом здесь является *теория возмущений*, распространяющая подход § 5.3, § 16.3 на релятивистский случай. К сожалению, для широкого класса задач, связанных с описанием сильных (ядерных) взаимодействий на относительно больших расстояниях, теория возмущений не работает, т. к. не выполняется критерий её применимости. В этих случаях обычно используют «квантово-гидродинамически и квазиклассически мотивированные» феноменологические модели. Уравнения квантовой теории сильного взаимодействия пытаются решать ныне с помощью интегрирования на решетках, но хотелось бы, чтобы эти решения дали больше нового.

#### ■ Фундаментальные законы сохранения.

Как показано в § 2.2, инвариантность системы по отношению к некоторым классам преобразований влечёт за собой сохранение некоторых физических величин. Список таких соответствий, включающий и релятивистские законы сохранения, приведен в таблице 2.1 на стр. 61.

В дополнение к обсуждению в § 2.2, мы обсудим некоторые законы сохранения, существенные в релятивистских задачах. По конструкции, взаимодействия частиц и античастиц одинаковы (с точностью до знака заряда), т. е. не меняются при зарядовом сопряжении  $f \leftrightarrow \bar{f}$ . Эта инвариантность отвечает *закону сохранения зарядовой четности C*. Отражение времени (переход от движения вперед по времени к ретроградному движению, назад по времени, от  $t$  к  $-t$ ) описывается

уравнением, комплексно сопряжённым к уравнению Шредингера. Это инвариантность по отношению к обращению времени. Ей отвечает закон сохранения временной четности  $T$ . Собственные значения операторов  $\hat{C}$  и  $\hat{T}$  могут быть равны только  $+1$  или  $-1$ , как и оператора  $\hat{P}$ , § 2.3. В частности, пара электрон–позитрон может находиться в зарядово чётном состоянии ( $C = 1$ ), или зарядово нечётном состоянии ( $C = -1$ ) или в состоянии без определённой зарядовой четности.

- В некоторых взаимодействиях пространственная, временная и зарядовая четности сохраняются по отдельности, в некоторых — не сохраняются. Паули и Людерец показали, что при весьма общих условиях сохраняется комбинированная четность  $\hat{P}\hat{C}\hat{T}$ . При этом с необходимостью волновая функция коллектива тождественных частиц с полужелым спином антисимметрична по их перестановке, а волновая функция коллектива тождественных частиц с целым спином симметрична по их перестановке (*связь спина со статистикой*, § 13.1).

- Для ультрарелятивистских частиц полезным является понятие спиральности — проекции спина частицы на её импульс. Для частиц со спином  $\sigma$  спиральность  $+\sigma$  отвечает максимальному значению этой проекции, направленному вдоль импульса, а  $-\sigma$  — против импульса. По аналогии со случаем циркулярной поляризации света говорят, что частицы со спиральностью  $-\sigma$  левополяризованы, а частицы со спиральностью  $+\sigma$  правополяризованы. Для частиц с нулевой массой покоя спиральность не меняется при преобразованиях Лоренца. Для ультрарелятивистских частиц имеет место приближённое сохранение спиральности.

## § G.2. Элементарные частицы

Первые элементарные частицы были открыты в экспериментах с газоразрядными трубками (электрон) или при изучении радиоактивного распада (протон и нейтрон). Понятие фотона как частицы было изобретено в 1905 г. Эйнштейном для объяснения фотоэффекта (см. § 16.6) и спектрального распределения излучения чёрного тела (Планка). Некоторые из частиц были открыты в космических лучах. Ныне все элементарные частицы обнаруживаются в опытах на ускорителях, среди которых в последние десятилетия особенно важную роль играют ускорители со встречными пучками — коллайдеры.

Электрон–позитронные коллайдеры с энергией в системе центра масс  $2E = 1 \div 11$  ГэВ работают в России (Новосибирск), Италии, США, Японии, Китае. С 2000–2008 г. прекратились исследования физики частиц на линейном электрон–позитронном коллайдере SLAC в США с  $2E \lesssim 100$  ГэВ и Большом электрон–позитронном коллайдере LEP в CERN (Женева) с  $2E \lesssim 200$  ГэВ; здесь были получены высокоточные данные о переносчиках слабого взаимодействия —  $W^\pm$ - и  $Z$ -бозонах. С 2009 г. в США работает коллайдер RHIC, в котором сталкиваются релятивистские тяжёлые ядра (золота) с энергией каждого ядра примерно 100 ГэВ на нуклон и прекратил работу протон–антипротонный коллайдер TEVATRON с  $2E = 2000$  ГэВ = 2 ТэВ. С 2010 г. CERN (Женева) ведутся эксперименты на Большом адронном коллайдере LHC, где сталкиваются протоны с  $2E = 14$  ТэВ, после 2020 г. предполагается начать работы по сооружению международного линейного электрон–позитронного коллайдера ILC с  $2E = 500 \div 1000$  ГэВ.

■ Обнаруженные к настоящему времени фундаментальные частицы перечислены в таблицах В.1 и В.2. Фермионы (лептоны и кварки) образуют три «поколения» со сходными свойствами, различающиеся только значениями масс<sup>1</sup>. В таблице В.3 перечислены пока не обнаруженные частицы, существование которых кажется ныне несомненным.

■ **Лептоны**  $\ell$  — частицы со спином  $1/2$ , участвующие только в электромагнитных и слабых взаимодействиях. Заряженные лептоны имеют заряд, равный заряду электрона (с тем же знаком), их античастицы  $\bar{\ell}$  положительно заряжены. Нейтральные лептоны — нейтрино ( $\nu_\ell$ ) стабильны и имеют спиральность  $-1/2$  (левополяризованы). Они имеют почти нулевую массу покоя и отличаются от антинейтрино  $\bar{\nu}_\ell$ , по разному взаимодействию с различными другими частицами.

Хорошо известный пример лептона — отрицательно заряженный **электрон**  $e \equiv e^-$ . При рождении электрона в слабом взаимодействии (распаде) одновременно с ним появляется электрически нейтральное электронное антинейтрино  $\bar{\nu}_e$ . Положительно заряженную античастицу электрона  $\bar{e}$  называют «позитроном»  $e^+$ . При рождении позитрона в слабом взаимодействии (распаде) одновременно с ним появляется электронное нейтрино  $\nu_e$ . Эти факты интерпретируются как сохранение

<sup>1</sup>Под именем масс частиц  $M$  и их ширин  $\Gamma$  мы приводим величины  $Mc^2$  и ширин  $\Gamma c^2$ , выраженные в энергетических единицах эВ (МэВ, ГэВ). Все заряды измеряются в единицах заряда электрона.

слабого электронного заряда  $\mathcal{L}_e$ , определяемого следующим образом:  $\mathcal{L}_e(e) = \mathcal{L}_e(\nu_e) = 1$  и  $\mathcal{L}_e(\bar{e}) = \mathcal{L}_e(\bar{\nu}_e) = -1$ .

Совершенно неожиданно для исследователей были обнаружены две пары более тяжёлых дублеров пары  $e, \nu_e$ :

∇ мюон (мю-мезон)  $\mu$ , имеющий время жизни  $\sim 2 \cdot 10^{-6}$  сек, вместе с мюонным нейтрино  $\nu_\mu$  (*второе поколение*),

∇ тау-лептон  $\tau$ , имеющий время жизни  $\sim 3 \cdot 10^{-13}$  сек, вместе с тау-нейтрино  $\nu_\tau$  (*третье поколение*).

С точки зрения классификации эти лептоны отличаются от лептонов первого поколения только массой заряженного лептона. По аналогии с электронным для них вводятся мюонный  $\mathcal{L}_\mu$  и  $\tau$   $\mathcal{L}_\tau$  лептонные заряды так, что  $\mathcal{L}_\mu(\mu) = \mathcal{L}_\mu(\nu_\mu) = 1$  и  $\mathcal{L}_\tau(\tau) = \mathcal{L}_\tau(\nu_\tau) = 1$ . Эти заряды сохраняются в обычных слабых взаимодействиях.

До конца XX в. считалось установленным, что эти квантовые числа сохраняются по отдельности. В последние годы обнаружилось, что нейтрино имеют очень небольшую массу  $\lesssim 0,01 \div 0,1$  эВ и самопроизвольно превращаются друг в друга («перекачиваются», как при биениях в связанных колебательных системах), нарушая закон сохранения отдельных лептонных зарядов.

Поэтому определяется ещё одно квантовое число — *лептонный заряд*  $\mathcal{L} = \mathcal{L}_e + \mathcal{L}_\mu + \mathcal{L}_\tau$ , который сохраняется во всех известных нам взаимодействиях. Для всех перечисленных лептонов  $\mathcal{L} = 1$ , для антилептонов  $\mathcal{L} = -1$ , и полный лептонный заряд сохраняется. Существуют представления, по которым и этот закон сохранения может нарушаться во взаимодействиях на чудовищно малых расстояниях, недоступных современным ускорителям, уступая место сохранению суммы лептонного и барионного  $\mathcal{B}$  (см. ниже) зарядов  $\mathcal{L} + \mathcal{B}$ . Это нарушение могло бы диагностироваться как нестабильность протона. Современные эксперименты показывают, что время жизни протона  $T_p$  превышает  $10^{30}$  лет, т. е. по крайней мере на 20 порядков больше времени жизни Вселенной. (Для ряда возможных каналов распада установлено даже, что  $T_p > 10^{33}$  лет.)

В сильных взаимодействиях сохраняются также странность  $S$ , равная  $-1$  для  $s$ -кварка, charm  $C$ , равный 1 для  $c$ -кварка, beauty (bottom), равный  $-1$  для  $b$ -кварка и top, равный 1 для  $t$ -кварка.

■ Наблюдаемые частицы, участвующие в ядерных (сильных) взаимодействиях, называют **адронами**. Для них определяются спин  $J$ ,

Таблица G.3. Фундаментальные фермионы со спином  $1/2$ , массы — в МэВ

		лептоны, $L = 1$		кварки, $B = 1/3$ , 3 цвета	
		$\ell$	$\nu_\ell$	$U$	$D$
заряд		-1	0	+2/3	-1/3
I	имя	$e$	$\nu_e$	$u$	$d$
	масса	0,511	0	$1,5 \div 4$	$4 \div 8$
II	имя	$\mu$	$\nu_\mu$	$s$	$c$
	масса	105,7	0	$80 \div 130$	$1150 \div 1350$
III	имя	$\tau$	$\nu_\tau$	$b$	$t$
	масса	1777	0	$4100 \div 4900$	174000

изотопический спин  $I$  (§ 15.3), барионный заряд  $B$  и другие квантовые числа, обсуждаемые ниже. (Разумеется, адроны участвуют и во всех других взаимодействиях.)

Каждые два года международная Particle Data Group издаёт толстый том, содержащий помимо лептонов и *калибровочных бозонов* список из более чем двухсот частиц, которые принято называть элементарными. Почти все они нестабильны, и можно пытаться говорить, что они состоят из своих продуктов распада. Но вот беда — большинство из этих продуктов распада тоже нестабильны (см. разд. 2.8), они распадаются на разные более легкие частицы, а те часто могут распадаться ещё дальше. Здесь мы перечислим некоторые из этих частиц. *Адроны подразделяют на два больших семейства.*

◇ **Барионы** — адроны с полуцелым спином  $J$ . Их наиболее известные представители — нуклоны с  $I = J = 1/2$  (стабильный протон и почти стабильный с точки зрения ядерных взаимодействий нейтрон — § 15.3). Для нейтрального  $\Lambda$ -гиперона  $I = 0$ ,  $J = 1/2$ , для  $\Sigma$ -гиперона (с состояниями  $\Sigma^-, \Sigma^0, \Sigma^+$ )  $I = 1$ ,  $J = 1/2$ , для  $\Delta$  резонанса (с состояниями  $\Delta^-, \Delta^0, \Delta^+$ )  $I = J = 3/2$ , и т. д. Для адронов определяют специальное квантовое число — *барионный заряд*  $B$  так, что для барионов  $B = 1$ , для антибарионов  $B = -1$ , для мезонов  $B = 0$ . Барионный заряд сохраняется во всех известных нам взаимодействиях.

◇ **Мезоны** — это адроны с целым спином и барионным числом  $B = 0$ . Их наиболее известный представитель — псевдоскалярный  $\pi$ -мезон (пион) с  $I = 1$ ,  $J = 0$ , гл. 15.3, с массой  $m_{\pi^\pm} = 139,6$  МэВ/ $c^2$ ,

$m_{\pi^0} = 135 \text{ МэВ}/c^2$  и временами жизни  $\tau_{\pi^\pm} = 2,6 \cdot 10^{-8} \text{ с}$  и  $\tau_{\pi^0} = 6,4 \cdot 10^{-17} \text{ с}$ . Помимо того, полезно отметить  $\rho$ -мезон с  $I = J = 1$ , с массой  $776 \text{ МэВ}/c^2$  и шириной  $\Gamma = 150 \text{ МэВ}/c^2$  и псевдоскалярный  $K$ -мезон (каон) с массой  $495 \text{ МэВ}/c^2$  и  $J = 0$ ,  $I = 1/2$ .  $K$ -мезон обладает новым квантовым числом — *странностью*  $S$ , которая сохраняется в сильных взаимодействиях, с их точки зрения каоны стабильны, их время жизни (различное для разных каонов) определяется слабым взаимодействием. Время жизни  $K^\pm$  составляет  $1,3 \cdot 10^{-8} \text{ сек}$ . Заметим, что  $K^0$  и  $\bar{K}^0$  по-разному участвуют в сильных взаимодействиях. Их массы и все квантовые числа, кроме странности, совпадают, но слабые взаимодействия не сохраняют странность, и это вырождение снимается (см. разд. 5.5) так, что физическими оказываются состояние  $K_S = (K^0 + \bar{K}^0)/\sqrt{2}$ , распадающееся в основном на два пиона, со временем жизни  $10^{-10} \text{ сек}$  и состояние  $K_L = (K^0 - \bar{K}^0)/\sqrt{2}$ , распадающееся в основном на три пиона, со временем жизни  $5 \cdot 10^{-8} \text{ сек}$ .

При столкновении барион с антибарионом могут аннигилировать, превращаясь в фотоны или в мезоны (последнее более вероятно).

• Многообразие свойств адронов и их взаимодействий получает естественное описание в **кварковой модели**. Кварки ( $q = u, d, s, c, b, t$ ) — это частицы со спином  $1/2$ , барионным числом  $\mathcal{B} = 1/3$  и электрическим зарядом  $2/3$  или  $-1/3$ . (Для антикварков  $\mathcal{B} = -1/3$ , а заряды равны соответственно  $-2/3$  и  $1/3$ ). «Тип» кварка ( $u, d, s, c, b, t$ ) называют *ароматом*. *Ядерные (сильные) и электромагнитные взаимодействия сохраняют аромат*. Каждый из кварков может существовать в трёх различных состояниях, которые принято называть «цветом». Сильные взаимодействия обладают цветовой симметрией, в некоторой мере похожей на изотопическую. Названия цветов — *красный, зелёный и синий* — подобраны так, чтобы состояние, составленное из всех трёх цветов, было бы бесцветным для человеческого глаза<sup>1</sup>. Существование разных сортов **кварков** можно считать надёжно установленным, в то же время непосредственно эти частицы не наблюдались, и мы убеждены, что существует закон Природы, допускающий наблюдение только бесцветных комбинаций кварков и антикварков —

<sup>1</sup>Для знакомых с элементами теории групп. Алгебра операторов момента импульса реализуется как алгебра матриц Паули — матриц 2 ранга с равным нулю следом и детерминантом, равным 1, её называют алгеброй  $SU(2)$ . Таким же образом алгебра цветовой симметрии реализуется как алгебра матриц 3 ранга с равным нулю следом и детерминантом, равным 1, её называют алгеброй  $SU(3)$ .

с целым зарядом (*удержание цвета — confinement*)<sup>1</sup>. Именно поэтому массы кварков в таблице В.1 столь неопределённые, это модельно зависимые величины, для *t*-кварка приведено среднее экспериментальное значение.

◇ Барионы — это трёхкварковые бесцветные состояния. Например, протон — это состояние  $uud$ , а нейтрон —  $udd$ ,  $\Sigma^+ = uus$ ,  $\Sigma^- = dds$ . Если обозначить значком  $\uparrow$  состояние со спином, направленным «вверх», а значком  $\downarrow$  — со спином, направленным в противоположную сторону, то  $\Lambda$ -гиперон — это  $(s(u\uparrow d\downarrow - d\uparrow u\downarrow)\sqrt{2})$ , а  $\Sigma^0$  это  $(s(u\uparrow d\downarrow + d\uparrow u\downarrow)\sqrt{2})$ . Изотопическая симметрия есть просто симметрия между *u*- и *d*-кварками, различие между массами которых пренебрежимо мало по сравнению с массами адронов. Три спина кварков в адроне в сумме могут дать спин 1/2 (это нуклоны,  $\Lambda$ - и  $\Sigma$ -гипероны) и спин 3/2 (это — различные резонансные состояния). Особо следует упомянуть  $\Delta$ -резонанс с зарядом  $2e$ . Поскольку спин этой частицы равен 3/2, то её кварковый состав с учётом спинов можно записать как  $(u\uparrow u\uparrow u\uparrow)$ . На первый взгляд, такое состояние (три одинаковых фермиона) запрещено принципом Паули, но оно существует! Чтобы справиться с этим противоречием, и было изобретено понятие *цвета* кварка так, что все кварки находятся в разных цветовых состояниях, а получившееся состояние бесцветно. Разумеется, существуют «очарованные» барионы  $cuu$ ,  $cds$ , «прекрасные» барионы  $buu$ ,  $bdu$ ,  $bsu$ ,  $bcd$  и т. п. Почти вся наблюдаемая во Вселенной ядерная материя состоит из кварков первого поколения, *u* и *d*.

◇ Мезоны — это бесцветные состояния кварк-антикварк. Например,  $\pi^+ = u\bar{d}$ ,  $\pi^- = d\bar{u}$ ,  $\pi^0 = (u\bar{u} - d\bar{d})/\sqrt{2}$ ,  $K^+ = u\bar{s}$ ,  $K^- = s\bar{u}$ ,  $K^0 = u\bar{s}$ ,  $\bar{K}^0 = s\bar{u}$ . В этих состояниях обычные спины кварков антипараллельны. Поэтому спин перечисленных мезонов нулевой. Состояния, в которых спины кварка и антикварка параллельны, имеют спин 1, это  $\rho$ -мезон (кварковый состав которого тот же, что и у пиона, за исключением направлений спинов) и другие частицы. Наблюдаются также «очарованные» *D*- и *F*-мезоны  $c\bar{u}$  и др., «прекрасные» *B* мезоны  $b\bar{d}$  и т. п. Существование соответствующих тяжёлых кварков было окончательно осознано после открытия очень узких резонансных состояний со спином 1  $J(\Psi) \equiv (c\bar{c})$  и  $\Upsilon \equiv (b\bar{b})$ . Замечу, что мезоны и барионы, в состав которых входили бы *t*-кварки, не образуются. Дело в том, что *t*-кварк очень быстро распадается (на *W*-бозон и *b*-кварк) так, что за

<sup>1</sup>В упрощённом описании цветные состояния связаны силами, потенциал которых линейно растёт с ростом расстояния.

время его жизни водородоподобная система типа  $t\bar{u}$  просто не успеет сделать ни одного оборота ( $\hbar/\Gamma_t \lesssim \hbar/(m_q\alpha_s^2)$ ).

◇ Многие исследователи утверждают, что некоторые из обнаруженных резонансов — четырёхкварковые мезонные или пятикварковые барионные состояния типа  $(qq\bar{q}\bar{q})$  и  $qqq(q\bar{q})$ , однако эта интерпретация не получила пока всеобщего признания.

Сохранение аромата в сильных и электромагнитных взаимодействиях означает, что состояния с новыми ароматами могут появляться только парами. Так, можно наблюдать реакции  $\pi^+p \rightarrow \Sigma^+K^+$  и  $\pi^+p \rightarrow \Sigma^+D^+$  (т. е.  $u\bar{d}(uud) \rightarrow (suu)(\bar{s}u)$  и  $u\bar{d}(uud) \rightarrow (cuu)(\bar{c}u)$ ), а реакции  $\pi^-p \rightarrow \Sigma^+K^-$  ( $(d\bar{u})(uud) \rightarrow (suu)(\bar{u}s)$ ) или  $\pi^+\pi^- \rightarrow F^-D^+$  ( $(d\bar{u})(u\bar{d}) \rightarrow (s\bar{u})(\bar{c}u)$ ) не могут происходить.

Теорию взаимодействия кварков называют **квантовой хромодинамикой** — **КХД**.

### § G.3. Фундаментальные взаимодействия

К настоящему времени известны четыре фундаментальных взаимодействия. Каждое из них обладает некоторой формой калибровочной инвариантности, подобной (11.10) (но обычно более сложной), со своими компенсирующими — *калибровочными* полями и соответствующими этим полям частицами — калибровочными бозонами. При зарядовом сопряжении волновые функции всех нейтральных калибровочных полей (кроме гравитационного) меняют знак, т. е. эти калибровочные частицы  $C$ -нечётны.

■ **Электромагнитное взаимодействие** является основой большинства наблюдаемых в окружающем мире явлений. В таких взаимодействиях участвуют все заряженные частицы. Как уже говорилось, компенсирующим здесь является электромагнитное поле, кванты этого калибровочного электромагнитного поля — *фотоны*, имеющие спин 1. Электромагнитное взаимодействие сохраняет  $P$ ,  $C$  и  $T$  по отдельности. Помимо этого, оно сохраняет ароматы и лептонные числа отдельных лептонов.

■ **Слабое взаимодействие** отвечает за  $\beta$ -распад и подобные ему процессы. В этих взаимодействиях участвуют все известные ныне частицы. Они не сохраняют  $P$  и  $C$  по отдельности, но сохраняют произведение  $CP$ , т. е. распределения частиц при распаде частицы и античастицы получаются одно из другого с помощью пространственного

отражения. В грубом приближении слабые взаимодействия сохраняют принадлежность кварков к поколению, этот закон сохранения является приближённым, отклонение от закона сохранения можно описать как небольшой поворот базиса в пространстве поколений.

Таблица G.4. Фундаментальные бозоны Стандартной Модели, массы  $M$  и ширины  $\Gamma$  — в ГэВ

	Взаимодействие	Спин	Заряд	$M$	$\Gamma$
Фотон $\gamma$	электромагнитное	1	0	0	0
$W^\pm$	электро-	1	$\pm 1$	80,4	2,1
$Z$	сла-	1	0	91,1	2,5
Бозон Хиггса $H$	бое	0	0	125	$\sim 0,01$
Глюон $g$	сильное	1	0	—	—

Загадкой для исследователей остаётся природа нарушения CP симметрии, наблюдаемого в некоторых слабых распадах частиц.

Ныне установлено, что электромагнитное и слабое взаимодействия — различные проявления единого **электрослабого взаимодействия**, обладающего высокой  $SU(2) \times U(1)$  симметрией, которая нарушается на расстояниях  $\sim \hbar c/v \sim 10^{-17}$  см, где  $v \approx 246$  ГэВ. Помимо *фотона*, квантами этого калибровочного взаимодействия являются *заряженные  $W^\pm$ -бозоны и нейтральные  $Z$ -бозоны со спином 1* (таблица B.2). Различия в массах и других свойствах заряженных  $W^\pm$  и нейтральных  $Z$  калибровочных бозонов связано с нарушением электрослабой симметрии. *Считается наиболее правдоподобным, что это нарушение обусловлено механизмом Хиггса*, который построен по образцу теории фазовых переходов второго рода. Соответствующий **нейтральный скалярный бозон Хиггса** с массой 125 ГэВ/ $c^2$  обнаружен в опытах на большом адронном коллайдере в CERN (Женева) в 2012 г.

■ **Сильное взаимодействие** отвечает за устойчивость и взаимопревращения ядер и ядерных частиц — **адронов**. Феноменологическая теория ядерных взаимодействий была кратко описана в § 15.3. На фундаментальном уровне это **квантовая хромодинамика (КХД)** — калибровочное взаимодействие кварков, обладающее симметрией  $SU(3)$  в пространстве цвета. В этом взаимодействии сохраняются по отдельности ароматы,  $P$ ,  $C$  и  $T$ . Калибровочные бозоны КХД — это 8 **глюонов**, различающихся цветом. Идеально масса глюона равна нулю, эффективное значение этой массы плохо определено. Глюоны, как цветные

объекты, непосредственно не наблюдаемы (удержание цвета), но считается весьма вероятным существование мезонных связанных состояний двух или более глюонов — *глоболлов*. Почти наверняка они уже отмечены в таблицах наблюдаемых частиц, но сказать что это глоболлы с определённой пока не представляется возможным.

**Набор из электрослабой теории и КХД называют Стандартной Моделью элементарных частиц (СМ).**

- В квантовой теории на короткое время, допускаемое соотношением неопределённостей, вблизи электрона появляется электрон-позитронная пара. Позитрон этой пары притягивается к начальному электрону, а электрон отталкивается. В результате исходное взаимодействие электрона с окружением частично экранируется, как при дебаевском экранировании, становится естественным говорить об эффективном заряде (константе взаимодействия) в зависимости от расстояния до источника. В электродинамике этот эффективный заряд при приближении к источнику растёт. В электрослабой теории и КХД переносчики взаимодействия заряжены, в итоге соответствующие эффективные константы при приближении к источнику убывают — если на умеренных расстояниях наблюдается некоторое взаимодействие, то при переходе к малым расстояниям оно ослабляется, становясь пренебрежимо слабым при  $r \rightarrow 0$  (*асимптотическая свобода*). В процессе уменьшения расстояний эффективные константы взаимодействия разных взаимодействий сближаются, и они совпадают на расстоянии  $\ell_{GU} \sim 2 \cdot 10^{-30}$  см ( $\hbar c / \ell_{GU} \sim 10^{16}$  ГэВ). Это даёт основания надеяться, что начиная с этих расстояний все наши взаимодействия сливаются в единое взаимодействие (**Великое объединение**) с очень высокой симметрией, которая разрушается на относительно больших расстояниях  $\sim \ell_{GU}$ . В разных обсуждаемых вариантах такого объединения возникают разнообразные новые частицы, массы которых на много порядков больше масс наблюдаемых частиц (таблицы В.1–В.3). Именно это объединение обеспечивает упоминавшуюся возможность нестабильности протона.

■ **Гравитационное взаимодействие** тоже можно представить как калибровочное. В отличие от электромагнитного взаимодействия, которое обеспечивает отталкивание одинаковых частиц друг от друга, гравитационное взаимодействие обеспечивает притяжение всех известных частиц друг к другу. Можно показать, что такое различие связано со спином калибровочного поля, ответственного за взаимодействие. От-

Таблица G.5. Не обнаруженные, но почти наверняка существующие частицы

	Спин	Масса	Откуда известно
гравитон	2	0	теория гравитации
темная материя	?	?	астрофизика
темная энергия	–	–	астрофизика

талкивание одинаковых частиц означает, что соответствующее калибровочное поле описывается векторным потенциалом. Его квантование даёт кванты калибровочного поля — фотоны со спином 1. Притяжение одинаковых частиц означает, что соответствующее калибровочное поле является скалярным или тензорным (второго ранга). Перенос гравитации скалярным полем исключен астрономическими наблюдениями. В итоге квантование гравитационного взаимодействия приводит к появлению калибровочных бозонов гравитационного поля — безмассовых **гравитонов** со спином 2.

Ввиду слабости гравитационного взаимодействия по сравнению с остальными, квантовые эффекты гравитационного поля до сих пор не наблюдались. Квантовый масштаб гравитационного взаимодействия определяется через ньютоновскую постоянную закона всемирного тяготения  $G_N$  величиной *массы Планка*  $M_{Pl}$

$$M_{Pl} = \sqrt{\hbar c / G_N} = 1,2 \cdot 10^{19} \text{ GeV}. \quad (\text{G.2})$$

Масса Планка  $M_{Pl}$  — чудовищно большая величина для всех известных частиц и возможностей их ускорения; *планковская длина*  $\ell_{Pl} = \hbar / (M_{Pl} c) = 1,6 \cdot 10^{-33} \text{ см}$ .

■ **Эволюция и состав вещества Вселенной.** Согласно современным представлениям, после Большого Взрыва в процессе расширения Вселенной находящиеся от нас на расстоянии  $R$  звёздные объекты и галактики удаляются от нас («убегают») со средней скоростью  $v = HR$ . Величину  $H$  называют постоянной Хаббла. В последние 10-15 лет удалось измерить её с большой точностью, используя наблюдение, что для вспышек сверхновых звёзд определённого типа собственная яркость (вблизи источника) однозначно связана со спектральным составом излучения. Поэтому расстояние до каждого из таких источников определяется по его видимой нам яркости. Скорость убегания источника определяется, как обычно, по доплеровскому смещению спектральных линий (*красное смещение*). Таким способом удалось заглянуть на

расстояния до 13 млрд. световых лет, и получить надежные значения постоянной Хаббла в различные моменты эволюции Вселенной.

Расширение Вселенной означает, что со временем средняя плотность её энергии  $\rho$  уменьшается. Уравнения теории гравитации Эйнштейна содержат параметр, отвечающий этой средней плотности энергии. Существует некоторое критическое значение этой плотности  $\rho_c = = 3H^2/(8\pi G_N)$ . В наше время  $\rho_c/c^2 = 0,95 \times 10^{-29} \text{ г/см}^3$  (с точностью лучше 10 %). При  $\rho > \rho_c$  Вселенная имела бы положительную среднюю кривизну (была бы замкнута в пространстве и времени). При  $\rho < \rho_c$  кривизна Вселенной была бы отрицательной, она была бы открытой. Важнейший для нас вывод из многочисленных астрофизических наблюдений состоит в том, что Вселенная в среднем — плоская и была такой в течение всей своей эволюции. Такое строение расширяющейся Вселенной возможно только при  $\rho = \rho_c$ . Из чего же складывается эта плотность?

Интерпретация различных астрофизических данных, включающих, помимо обсуждавшихся данных, также информацию о средней распространённости водорода, дейтерия, гелия и др. во Вселенной вне звёзд, позволили получить здесь неожиданно точные оценки.

Оказалось, что видимая материя, включающая все многообразие наблюдаемых частиц, (содержащаяся в звёздах, галактиках, космической пыли, реликтовом излучении и т. п.) доставляет не более 5% наблюдаемой плотности вещества во Вселенной (это главным образом, протоны, ядра и нейтрино, вклад реликтового излучения в  $\rho$  составляет примерно  $5 \times 10^{-5} \rho_c$ ).

Ещё  $27 \pm 4\%$  доставляет некая **тёмная материя**, участвующая в гравитационных взаимодействиях, но не проявляющая себя в других взаимодействиях. Она самым серьёзным образом влияет на движение галактик. Есть надежда, что природа этих частиц будет понята с помощью более или менее обычных экспериментов в течение ближайших 10–15 лет. (Многие современные обобщения СМ содержат частицы, которые могли бы выглядеть как тёмная материя, *просто их взаимодействия с обычными частицами очень слабые.*) Тёмная материя образует идеальный газ с уравнением состояния  $p = 2\rho/3$ .

Но  $68 \pm 4\%$  плотности космической энергии доставляет не вполне материальный объект — **тёмная энергия**, которую иногда сопоставляют с энергией вакуума, возникшей при фазовом переходе. Эффективное уравнение состояния для тёмной энергии имеет вид  $P = -\rho$ .

# Литература

- [1] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. — М.: Физматлит, 2004.
- [2] *Еллотин П. В., Кривченков В. Д.* Квантовая механика. — М.: Физматлит, 2001.
- [3] *Мессиа А.* Квантовая механика. — М.: Наука, 1978.
- [4] *Липкин Г.* Квантовая механика. — М.: Мир, 1977.
- [5] *Дирак П. А. М.* Принципы квантовой механики. — М.: Наука, 1979.
- [6] *Флюгге З.* Задачи по квантовой механике: в 2 т. — М.: Едиториал УРСС, 2010.
- [7] *Сербо В. Г., Хриплович И. Б.* Квантовая механика. — Новосибирск: НГУ, 2008.
- [8] *Зелевинский В. Г.* Лекции по квантовой механике. — Новосибирск: Сиб. унив. изд-во, 2002.
- [9] *Зелевинский В. Г.* Квантовая физика. Т. 1, 2, 3. — Новосибирск: НГУ, 2014, 2015.
- [10] *Медведев Б. В.* Начала теоретической физики. — М.: Физматлит, 2007.
- [11] *Буджер Д., Кимбелл Д., ДеМилль Д.* Атомная физика. Освоение через задачи. — М.: Физматлит, 2008.
- [12] *Фейнман Р., Хибс А.* Квантовая механика и интегралы по траекториям. — М.: Мир, 1968.
- [13] *Мигдал А. Б.* Качественные методы в квантовой теории. — М.: Наука, ФМ, 1975.
- [14] *Базь А. И., Зельдович Я.Б., Переломов А. М.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. — М.: Наука, ФМ, 1971.
- [15] *Белокуров В.В., Тимофеевская О.Д., Хрусталёв О.А.* Квантовая телепортация — обыкновенное чудо. — Ижевск: РХД, 2000.

- [16] *Гольдман И. И., Кривченко В. Д.* Сборник задач по квантовой механике. — М.: УНЦ ДЮ, 2001.
- [17] *Галицкий В. М., Карнаков Б. М., Коган В. И.* Задачи по квантовой механике. — М.: Едиториал УРСС, 2001.
- [18] *Альтшуль Л. М., Зелевинский В. Г., Коткин Г. Л. и др.* Сборник задач по квантовой механике. — Новосибирск: НГУ, 1974.
- [19] *Ткаченко О. А., Ткаченко В. А., Коткин Г. Л.* Компьютерный практикум по квантовой механике — Новосибирск: НГУ, 1996; Электронный практикум по квантовой механике. — Новосибирск: НГУ, 2012; <https://sourceforge.net/projects/quantx/>
- [20] *Кожеевников А. А.* Графен. Квантовые вычисления. — Новосибирск: НГУ, 2011.
- [21] *Гинзбург И. Ф., Погосов А. Г.* Электродинамика. (Релятивистское описание. Волновые явления). — Новосибирск: НГУ, 2010.
- [22] *Фейнман Р., Лейтон Р., Сэндс М.* Фейнмановские лекции по физике: в 10 т. Т. 6, 8, 9. — М.: Едиториал УРСС, 2004.
- [23] *В. А. Фок* // *Zs. f. Phys.* 1928. V. 47. P. 446–448.
- [24] *Вайнштейн А. И., Соколов В. В.* Эффект Бома–Аронова и принцип локальности в квантовой механике // *Ядерная физика.* 1975. Т. 22. С. 618.
- [25] *Коткин Г. Л., Сербо В. Г., Черных А. И.* Лекции по аналитической механике. — Новосибирск: НГУ, 2007.
- [26] *Кузнецов Е. А., Шапиро Д. А.* Методы математической физики. — Новосибирск: НГУ, 2011.
- [27] *Шапиро Д. А.* Математические методы физики. — Новосибирск: НГУ, 2014.
- [28] *Mertin N. D.* Boojums all and way through: Communicating science in a prosaic age. — Cambridge Univ. Press, 1990.
- [29] *Freedman S. J., Clauser J. F.* // *Physical Review Letters.* 1972. V. 28. P. 938  
*Roy E. S., Thompson R. H.* // *Physical Review Letters.* 1976. V. 37. P. 465.
- [30] *Боголюбов Н. Н., Ширков Д. В.* Введение в теорию квантованных полей. — М.: Физматлит, 1984.
- [31] *Гинзбург И. Ф.*, в печати (2018).

# Повторяющиеся обозначения и некоторые константы

## Стандартная номенклатура термов

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

$$\begin{aligned} \ell = & 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots \\ & s, p, d, f, g, h, \dots \end{aligned}$$

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

$\ell$  — 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  $Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2} \equiv \frac{mc^2\alpha^2}{2} = 13,6$  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.

$\lambda_e = \hbar / (m_e c) = 3,86 \cdot 10^{-11}$  см — комптоновская длина волны 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 = 11 604 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<sup>-3</sup> — воздух при нормальных условиях;

$n \approx 6 \cdot 10^{22}$  см<sup>-3</sup> — металл Al.



Полный ассортимент литературы издательств  
«Институт компьютерных исследований»  
и «Регулярная и хаотическая динамика»  
по самым доступным ценам представлен:



#### Прямое представительство

Россия, Ижевск  
Удмуртский государственный университет  
ул. Университетская, д. 1, корп. 4, оф. 201а/207  
Тел./факс: +7 (3412) 50-02-95  
E-mail: subscribe@rcd.ru, rhd-m@mail.ru

#### Интернет-магазин

**MAFFESS**

<http://shop.rcd.ru>

- Отправка заказов осуществляется почтой РФ из г. Ижевска
- Цены на сайте указаны без учета стоимости доставки

#### Книжные магазины и киоски



**Московский дом книги**  
Москва, ул. Новый Арбат, д. 8  
(м. «Арбатская»)  
Тел.: +7 (495) 789-35-91



**Дом технической книги**  
Москва, Ленинский проспект, д. 40  
(м. «Ленинский проспект»)  
Тел.: +7 (499) 137-60-19



**Магазин научной книги URSS**  
Москва, Нахимовский проспект, д. 56  
(м. «Профсоюзная»)  
Тел.: +7 (499) 724-25-45



**Книжная сеть «Буквоед»**  
Санкт-Петербург, ул. Минеральная, д. 13  
Тел.: +7 (812) 601-0-601

#### На просторах Интернета

  
<http://www.ozon.ru>

 Геомодель  
<http://www.eage.ru>

 Центр ИТ НефтеГаз  
<http://centrlit.ru>

  
НИИ «ИНФРА-М»  
<http://www.infra-m.ru>

  
Московский дом книги  
<http://www.mdk-arbat.ru>

 Инфра-Инженерия  
<http://www.infra-e.ru>

Каталог изданий для предприятий  
нефтегазового комплекса  
<http://www.yagello.ru>

  
Книжное поисковое агентство  
**ПРОФЕССИОНАЛЬНАЯ КНИГА**  
<http://chebakov.com>

  
<http://rus.logobook.ru>

  
<http://www.biblion.ru>

  
<http://www.bookvoed.ru>

  
**букбк**  
интернет-библиотека  
<http://www.ckbib.ru>

*Научное издание*

*Гинзбург Илья Файвильевич*

ОСНОВЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ  
(НЕРЕЛЯТИВИСТСКАЯ ТЕОРИЯ)

*Дизайнер А. А. Гурьянова*

*Технический редактор А. В. Бакиев*

Подписано в печать 18.06.2018. Формат 60 × 84 <sup>1</sup>/<sub>16</sub>.  
Печать офсетная. Усл. печ. л. 28,71. Уч.-изд. л. 29,31.  
Гарнитура Computer Modern Roman. Бумага офсетная № 1. Заказ № 18-25.

АНО «Ижевский институт компьютерных исследований»  
426057, г. Ижевск, ул. К. Маркса, д. 250, кв. 55  
E-mail: mail@rcd.ru Тел./факс: +7 (3412) 50-02-95