

МИНИСТЕРСТВО ОБЩЕГО И  
ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ

В.Г Сербо и И.Б. Хриплович

**КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ  
ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ**

Учебное пособие

Новосибирск  
1999

Пособие предназначено для студентов 3-го курса физического факультета. Содержание соответствует курсу “Квантовая механика”.

Печатается по решению методической комиссии физического факультета.

Пособие подготовлено при содействии Федеральной целевой программы “Государственная поддержка интеграции высшего образования и фундаментальной науки на 1997–2000 годы”, проект № 274.

Рецензент — профессор Мильштейн Александр Ильич.

© Новосибирский государственный университет. 1999

## **Предисловие к серии**

# Оглавление

§1. Предисловие .....	7
§2. Первые квантовомеханические понятия .....	7
§3. Соотношение неопределенностей. Оценки .....	9
§4. Координатное и импульсное представления. Операторы физических величин .....	11
§5. Оператор Гамильтона. Уравнение Шрёдингера .....	14
§6. Эрмитовы операторы .....	17
§7. Линейный осциллятор $U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ .....	18
Уровни энергии и волновые функции Операторы рождения и уничтожения	
§8. Временное уравнение Шрёдингера .....	22
§9. Одномерное рассеяние .....	24
§10. Коммутаторы. Снова соотношение неопределенностей. Уравнение Эренфеста. Теорема о вириале .....	26
§11. Оператор сдвига. Теорема Блоха .....	30
§12. Квазиклассическое приближение .....	32
§13. Квазистационарные состояния. $\alpha$ -распад .....	37
§14. Момент импульса .....	40
§15. Центральное поле .....	44
§16. Атом водорода .....	47
§17. Стационарная теория возмущений .....	51
Поляризуемость Силы Ван-дер-Ваальса	
§18. Стационарная теория возмущений при наличии вырождения .....	54
Двухуровневая система Эффект Штарка для атома водорода при $n = 2$	
§19. Уравнение Шрёдингера для частицы в электромагнитном поле .....	57
§20. Постановка задачи рассеяния. Амплитуда рассеяния .....	58
§21. Борновское приближение. Формула Резерфорда. Атомный формфактор .....	60
§22. Фазовая теория рассеяния .....	64
Понятие о неупругом сечении Оптическая теорема Упругое рассеяние медленных частиц	

Дифракционное рассеяние быстрых частиц на черном шаре	
Упругое рассеяние быстрых частиц на идеально отражающ-	
щем	
шаре	
Резонансное рассеяние	
§23. Гайзенберговское представление	70
§24. Опыт Штерна-Герлаха. Спин	72
§25. Матрицы Паули. Уравнение Паули	74
§26. Сложение моментов	76
§27. Правила отбора для матричных элементов скалярных и	
векторных операторов	79
§28. Усреднение векторного оператора	81
§29. Тождественность частиц	83
§30. Уравнение Клейна–Фока–Гордона	84
§31. Уравнение Дирака	86
Свободное движение дираковской частицы	
Рождение электрон-позитронных пар постоянным внешним	
электрическим полем	
Гамильтонова форма уравнения Дирака	
Сходство и различие уравнений Дирака и Клейна–Фока–Гордона	
Ультрарелятивистский предел уравнения Дирака	
§32. Релятивистский электрон в кулоновом поле. Тонкая	
структура	96
§33. Атом в магнитном поле	99
§34. Атом гелия	101
§35. Вариационный принцип	102
§36. Метод Томаса–Ферми	105
§37. Таблица Менделеева	106
§38. Разные типы связи в атомах	106
Случай $LS$ связи	
Случай $jj$ связи	
Пример: конфигурация $p^2$	
§39. Сверхтонкая структура (СТС)	111
§40. Изотопический сдвиг	113
§41. Нестационарная теория возмущений	114
§42. Фотоэффект	116
§43. Квантование электромагнитного поля	119
§44. Испускание и поглощение света	124

Спонтанное и вынужденное излучение	
Угловое распределение и интенсивность спонтанного дипольного излучения	
Правила отбора	
Поглощение света	
§45. Лэмбовский сдвиг .....	127
§46. Рассеяние света .....	130
§47. Молекулы .....	131
§48. ПРИЛОЖЕНИЕ: о формализме квантовой механики .....	132
Основные положения	
Вектора состояний и волновые функции	
Операторы. Связь представлений	

## §1. Предисловие

Пособие содержит краткий конспект лекций по квантовой механике для студентов 3-го курса физического факультета НГУ и набор задач, которые обычно решаются на семинарах. В нем приведены основные законы квантовой механики и необходимые формулы. Данное пособие не заменяет собой лекции и семинары, оно лишь поможет в усвоении предмета.

Принятые сокращения:

КМ — Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика, М.: Наука, 1989.

ГКК — Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике, М.: Наука, 1981.

## §2. Первые квантовомеханические понятия

### Квантовая природа света

Излучение абсолютно черного тела. Рассматривается спектральный состав электромагнитного излучения, находящегося в равновесии со стенками полости, поддерживаемыми при постоянной температуре. Моделируя стенки полости набором осцилляторов (заряженных частиц, удерживаемых линейными силами вблизи положения равновесия), Планк (1900 г.) сумел объяснить экспериментально наблюдаемый спектр излучения, предположив, что осцилляторы поглощают и испускают энергию порциями:

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

где  $\hbar = 1,05 \cdot 10^{-27}$  эрг·с.

Фотоэффект  $\gamma + A \rightarrow e + A'$ , его основные законы, наличие “красной границы”. Уравнение Эйнштейна (1905 г.)

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

где  $I$  — работа выхода, фотоны.

Эффект Комптона  $\gamma + e \rightarrow \gamma + e$  (рис.1). Покажите, что из предположения

$$E_\gamma = \hbar\omega, \quad p_\gamma = \hbar k$$

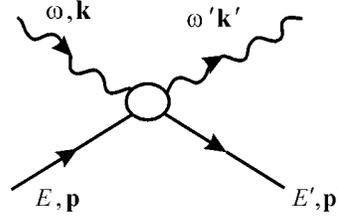


Рис. 1: Кинематика эффекта Комптона

и из законов сохранения

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

следует, что наблюдавшееся Комптоном (1924 г.) изменение длины волны рентгеновского излучения при рассеянии на первоначально неподвижном электроном равно

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

Здесь

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

— комptonовская длина волны электрона.

Понятие о нелинейном фотоэффекте и нелинейном эффекте Комптона.

### Волновые свойства частиц

Опыты Резерфорда по рассеянию  $\alpha$ -частиц (1911 г.), планетарная модель атома:  $R_{\text{я}} \sim 10^{-13} \div 10^{-12}$  см,  $a_{\text{ат}} \sim 10^{-8}$  см. Стабильность и стандартность атомов, противоречия с классической физикой.

Гипотеза де Бройля о волновых свойствах частиц (1923 г.)

$$\omega = \frac{E}{\hbar}, \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar},$$

ее экспериментальное подтверждение.

Дифракция электронов, нейтронов, атомов и т.д. Вероятностная интерпретация квадрата модуля волновой функции  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ .

Плоская волна

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)},$$

фазовая скорость

$$u = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p}.$$

Волновой пакет, близкий к монохроматической волне:

$$\psi(x, t) = \int_{k_0 x - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} dk A(k) e^{i(kx - \omega t)} = A(k_0) e^{i(k_0 x - \omega_0 t)} f(x, t), \quad (2.1)$$

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

где

$$v = \left. \frac{\partial \omega}{\partial k} \right|_{k_0} = \left. \frac{\partial E}{\partial p} \right|_{p_0}$$

— групповая скорость. Расплывание пакета.

### §3. Соотношение неопределенностей. Оценки

В монохроматической плоской волне  $\Delta p = 0$ ,  $\Delta x = \infty$  и  $\Delta E = 0$ ,  $\Delta t = \infty$ . Из формулы (2.1) видно, что в пакете при фиксированном  $t$  амплитуда  $f(x, t)$  заметно отлична от нуля в области размером  $\Delta x \gtrsim 1/\Delta k$ , то есть

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

Разброс частот  $\Delta \omega \sim (\partial \omega / \partial k) \Delta k$  и при фиксированном  $x$  из (2.1) видно, что  $f(x, t)$  заметно отлична от нуля в интервале времен  $\Delta t \gtrsim 1/\Delta \omega$ , то есть

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

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

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

Из  $\Delta x^2 \sim x^2$  и  $\Delta p^2 \sim p^2$  получаем

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

Минимум функции  $E(\Delta x)$  соответствует

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

что дает  $E_{\min} \sim \hbar\omega$  (точное значение  $E_{\min} = \frac{1}{2}\hbar\omega$ ).

Покажите, что энергия основного состояния атома водорода

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

## ВОПРОСЫ

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

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

Найдите  $\hbar\omega'$  для  $\hbar\omega = 1,2 \text{ эВ}$  (инфракрасный лазер на неодимовом стекле),  $E = 46 \text{ ГэВ}$  (ускоритель SLAC, опыты по нелинейному эффекту Комптона, 1996 г.) и  $\hbar\omega = 1,2 \text{ эВ}$ ,  $E = 5 \text{ ГэВ}$  (ускоритель ВЭПП-4М, опыты по расщеплению фотона в поле ядра, 1997 г.).

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

**3.3.** Оценить энергию электрона, необходимую для изучения строения атома, атомного ядра, протона.

**3.4.** Ультрахолодными называются нейтроны, скорость которых  $v \lesssim 1 \text{ м/с}$ . Найти их длину волны и температуру.

**3.5.** Найти  $|\psi(x, t)|^2$ , если

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

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

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

(нерелятивистская свободная частица массы  $m$ ).

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

**3.7.** Используя соотношение неопределенностей, оценить глубину уровня в одномерной мелкой яме.

## §4. Координатное и импульсное представления.

### Операторы физических величин

Плотность вероятности найти частицу в точке  $x$  — величина  $dW/dx$  — пропорциональна  $|\psi(x, t)|^2$ . Если  $\psi(x, t)$  нормирована условием

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

то

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

Тогда среднее значение  $x$  равно

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

Аналогично, среднее значение любой функции  $F(x)$  равняется

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

Если

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

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

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

Если

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

то и

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

Здесь

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

— нормированный Фурье-образ функции  $\psi(x)$ , то есть

$$\psi(x) = \int dk \varphi(k) \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}; \quad \varphi(k) = \int dx \psi(x) \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (4.1)$$

Поэтому

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

и

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

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

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

выражение  $\varphi(k)$  через  $\psi(x)$  из (4.1), получим

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

Используя тождество

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

и интегрируя по  $x$  по частям, получим окончательно

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

Здесь при интегрировании по  $k$  использована известная формула

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

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

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

где оператор

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}. \quad (4.2)$$

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

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

В частности, оператор импульса в  $x$ -пространстве определяется формулой (4.2), а в  $p$ -пространстве — это просто оператор умножения  $\hat{p} = p$ . Аналогично, оператор  $\hat{x} = x$  в  $x$ -пространстве и

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

в  $p$ -пространстве.

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

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

## ВОПРОСЫ

**4.1.** Для потенциального ящика вида

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

найти  $E_n$  и  $\psi_n(x)$ . Оценить  $E_n$  для

а) частицы массы  $m \sim 1$  г в ящике с  $a \sim 1$  см;

б) молекулы  $\text{H}_2$  в ящике с  $a \sim 1$  см; найти  $n$ , соответствующий энергии  $E_n \sim kT$ , где  $T \sim 300$  К; оценить  $(E_n - E_{n-1})/E_n$  для данной энергии;

в) электрона в ящике с  $a \sim 10^{-8}$  см.

Сравнить классическую плотность вероятности, определенную соотношением

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

где  $T_{\text{класс}}$  — классический период колебаний, и квантовую плотность вероятности  $dW/dx = |\psi_n(x)|^2$  при  $n = 1$  и  $n \gg 1$ . Провести такое же сравнение для  $dW/dp$  — плотности вероятности в импульсном пространстве.

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

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

**4.3.** Найти  $\varphi(\mathbf{k})$  для

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

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

## §5. Оператор Гамильтона. Уравнение Шрёдингера

Классическая функция Гамильтона

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

заменяется оператором Гамильтона

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

Собственная функция этого оператора с собственным значением  $E_n$  удовлетворяет уравнению Шрёдингера (УШ) (1925 г.)

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

Решения этого уравнения ищутся в классе однозначных и непрерывных функций. В случае связанных состояний эти функции нормируемы (для них  $\int dx |\psi_n(x)|^2 = 1$ ) и поэтому  $\psi_n(x) \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \pm\infty$ .

Поведение производной  $\psi'(x)$  определяется видом потенциала. Интегрируя УШ в малой окрестности точки  $x = a$ , получаем

$$\int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} dx \psi''(x) = \psi'(a+\varepsilon) - \psi'(a-\varepsilon) =$$

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

то есть  $\psi'(x)$  непрерывна в точке  $x = a$ , если потенциальная энергия  $U(x)$  непрерывна в этой точке или имеет разрыв 1-го рода (конечный скачок). У потенциалов, имеющих скачки 2-го рода,  $\psi'(x)$  может иметь разрывы (см. пример потенциального ящика). Для  $U(x) = -G \delta(x - a)$  имеем

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

**Дискретные уровни в одномерной задаче всегда невырождены**, то есть каждому собственному значению энергии соответствует единственная собственная функция. Допустим обратное: пусть

$\psi_1(x)$  и  $\psi_2(x)$  — две разные собственные функции  $\hat{H}$ , отвечающие одному значению  $E$ . Тогда

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

или

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

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

В одномерной задаче дискретные уровни **четного гамильтониана**,  $\hat{H}(-x) = \hat{H}(x)$ , имеют **определенную четность**, то есть либо  $\psi_n(-x) = +\psi_n(x)$ , либо  $\psi_n(-x) = -\psi_n(x)$ . Действительно, для такого гамильтониана функции  $\psi_n(x)$  и  $\psi_n(-x)$  являются решениями, отвечающими одному и тому же значению  $E_n$ , то есть, по предыдущему утверждению,  $\psi_n(x) = C\psi_n(-x)$ . Сделав еще одно отражение координат, получим  $\psi_n(-x) = C\psi_n(x) = C^2\psi_n(-x)$ , откуда  $C = \pm 1$ .

## Пример

Прямоугольная потенциальная яма глубиной  $V$  и шириной  $2a$ , то есть

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

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

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

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

Четные решения имеют вид

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

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

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

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

Найдите нечетные решения и покажите, что четные и нечетные уровни чередуются.

Покажите, что в мелкой яме,  $V \ll \hbar^2/(ma^2)$ , существует лишь одно связанное состояние с энергией

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

и волновой функцией

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

Оцените  $\Delta x$  и  $\Delta p$  для такой ямы. Покажите, используя условие (5.1), что потенциальной энергии  $U(x) = -G\delta(x)$  соответствует мелкая яма с

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

## Осцилляционная теорема

Волновая функция дискретного спектра  $\psi_n(x)$ , соответствующая  $(n+1)$ -му по величине собственному значению  $E_n$ , обращается в нуль (при конечных  $x$ )  $n$  раз (см. примеры потенциального ящика, осциллятора и т.д.).

## ВОПРОСЫ:

**5.1.** Найти  $E_n$  и  $\psi_n(x)$  для поля

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

**5.2.** Найти уровни энергии и волновые функции связанных состояний частицы в поле двух  $\delta$ -ям  $U(x) = -G\delta(x+a) - G\delta(x-a)$  при условии  $a \gg \hbar^2/(mG)$ . Исследовать зависимость уровней энергии от  $a$ .

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

## §6. Эрмитовы операторы

Назовем оператор  $\hat{B}$  эрмитово сопряженным к оператору  $\hat{A}$ , если для любых двух функций  $\psi_1$  и  $\psi_2$  справедливо соотношение

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

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

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

Собственные значения эрмитова оператора вещественны:

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

Отсюда следует, что  $\lambda = \lambda^*$ .

Аналогично показывается, что среднее значение эрмитова оператора  $\int dx \psi^* \hat{A} \psi$  в каком-либо квантовом состоянии  $\psi$  – вещественное число. Все операторы физических величин эрмитовы.

Собственные функции, отвечающие различным собственным значениям эрмитова оператора, взаимно ортогональны. Действительно, домножив  $\hat{A} \psi_\lambda = \lambda \psi_\lambda$  на  $\psi_\mu^*$ , а  $(\hat{A} \psi_\mu)^* = \mu \psi_\mu^*$  на  $\psi_\lambda$ , и проинтегрировав, получим

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

то есть

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

В случае вырождения можно выбрать собственные функции ортогональными и, соответственно, использовать ортонормированную систему функций

$$\int dx \psi_m^* \psi_n = \delta_{mn}.$$

Полнота системы собственных функций эрмитового оператора:

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

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

Отсюда

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

**Дираковские обозначения.** Матричный элемент

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

В этих обозначениях эрмитовость имеет вид

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

ортонормируемость означает

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

а полнота —

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

## ВОПРОСЫ

**6.1.** Найти операторы, сопряженные к операторам

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

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

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

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

**6.5.** Найти вид оператора  $\hat{A} = 1/r$  в импульсном пространстве (задача 1.47 ГКК).

## §7. Линейный осциллятор $U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

### Уровни энергии и волновые функции

В этой задаче естественная система единиц включает  $\hbar$ ,  $m$ ,  $\omega$ . Из них строится единица длины  $\ell = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ , энергии  $\hbar\omega$  и т.д. (найдите

единицы времени, скорости, импульса, силы). Перейдем к безразмерным величинам

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

при этом волновая функция  $\psi(x)$  связана с безразмерной  $\psi'(x')$  соотношением

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

Тогда мы получим УШ в виде

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

в дальнейшем штрихи опускаем.

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

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

где

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

Ищем  $v$  в виде ряда

$$v = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n$$

Возникающее таким образом уравнение

$$\sum_n x^n [(2E - 1 - 2n)a_n + (n+1)(n+2)a_{n+2}] = 0$$

приводит к рекуррентному соотношению для коэффициентов

$$a_{n+2} = \frac{2n+1-2E}{(n+1)(n+2)} a_n.$$

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

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_{n+2}}{a_n} = \frac{2}{n} \rightarrow 0$$

обеспечивает сходимость ряда при всех  $x$ , но  $v(x) \rightarrow e^{x^2}$  при  $x \rightarrow \pm\infty$ . Чтобы получить  $\psi(x) \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow \pm\infty$ , необходимо ряд для  $v(x)$  оборвать, положив

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

В итоге получаем уровни энергии и нормированные волновые функции

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

Здесь  $H_n$  – полиномы Эрмита:

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

Отметим, что

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

## Операторы рождения и уничтожения

Введем операторы

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

через которые гамильтониан записывается в виде

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

Нетрудно показать, что

$$\hat{H}\hat{a}^+ = \hat{a}^+(\hat{H} + 1), \quad \hat{H}\hat{a} = \hat{a}(\hat{H} - 1). \quad (7.1)$$

Пусть  $|n\rangle$  — нормированное состояние с энергией  $E_n = n + \frac{1}{2}$ , то есть

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

Тогда  $\hat{a}^+|n\rangle$  и  $\hat{a}|n\rangle$  — состояния (ненормированные) с энергией  $E_n + 1$  и  $E_n - 1$  соответственно. Действительно, из (7.1) следует, что

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

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

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

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

$$\hat{a}^+|n\rangle = c_n|n + 1\rangle, \quad (7.2)$$

а действие оператора  $\hat{a}$  на состояние  $|n\rangle$  переводит его в состояние  $|n-1\rangle$ , то есть понижает энергию состояния на 1. Это позволяет использовать удобную интерпретацию: состояние  $|n\rangle$  содержит  $n$  одинаковых частиц (квантов) с энергией  $E = 1$  (или  $\hbar\omega$  в обычных единицах) каждая, оператор  $\hat{a}^+$  называют повышающим оператором или оператором рождения такой частицы, а оператор  $\hat{a}$  — понижающим оператором или оператором уничтожения. Заметим еще, что собственные значения оператора

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

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

Найдем коэффициент  $c_n$ . Для этого вычислим норму вектора (7.2):

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

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

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

а отличные от нуля матричные элементы операторов рождения и уничтожения равны

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

Волновая функция основного состояния может быть найдена из условия

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

Это дает

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

Для волновой функции с  $n > 0$  получаем компактное выражение

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

## ВОПРОСЫ

**7.1.** Найти  $\varphi_n(p)$  для линейного осциллятора.

**7.2.** Для линейного осциллятора сравнить классическую  $dW_{\text{класс}}/dx$  и квантовую  $|\psi_n(x)|^2$  плотности вероятности при  $n = 0$ .

То же для  $dW_{\text{класс}}/dp$  и  $|\varphi_0(p)|^2$ .

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

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

**7.4.** Найти  $\Delta x$  и  $\Delta p$  для линейного осциллятора в  $n$ -м состоянии.

## §8. Временное уравнение Шредингера

В классической механике импульс и энергия связаны с действием  $S(x, t)$  соотношениями

$$p = \frac{\partial S}{\partial x}, \quad E = -\frac{\partial S}{\partial t}.$$

Если в квантовой механике

$$p \rightarrow \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x},$$

то естественно ожидать, что

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}.$$

Проверим, что для плоской волны

$$\psi(x, t) = A e^{i(px - Et)/\hbar}$$

это так и есть:  $i\hbar \partial \psi / \partial t = E \psi$ .

Конечно, все это лишь наводящие соображения, показывающие естественность следующего утверждения: в квантовой механике **постулируется УШ** в виде

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}, t).$$

Его свойства:

1. УШ линейно: если  $\psi_1(\mathbf{r}, t)$  и  $\psi_2(\mathbf{r}, t)$  — решения УШ, то  $c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$  также является решением УШ (принцип суперпозиции).

2. УШ имеет первый порядок по времени, поэтому значения  $\psi(\mathbf{r}, t)$  в любой момент времени полностью определяется, если известна  $\psi(\mathbf{r}, t_0)$  в некоторый момент времени  $t_0$ .

Для стационарного решения

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

плотность вероятности  $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$  не зависит от  $t$ . Общее решение таково

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

где

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

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

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

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

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

с начальным условием

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

Из

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

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

### Плотность тока

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

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

Подставив  $\partial \psi / \partial t$  из УШ, получим уравнение непрерывности

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varrho}{\partial t} &= \frac{i\hbar}{2m} [\psi^* \nabla^2 \psi - (\nabla^2 \psi^*) \psi] = -\nabla \mathbf{j}, \\ \mathbf{j} &= \frac{1}{2m} [\psi^* (-i\hbar \nabla \psi) + (-i\hbar \nabla \psi)^* \psi]. \end{aligned}$$

Для

$$\psi = \sqrt{\rho} e^{i\phi}$$

имеем

$$j = \rho \frac{\hbar \nabla \phi}{m}.$$

В частности, для плоской волны  $\psi = A e^{i(kr - \omega t)}$  плотность тока равна

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

## §9. Одномерное рассеяние

Для потенциальной энергии указанного на рис. 2 вида ( $U(x) \rightarrow 0$  при  $x \rightarrow -\infty$ ,  $U(x) \rightarrow V$  при  $x \rightarrow +\infty$ ) задача рассеяния при  $E > V$

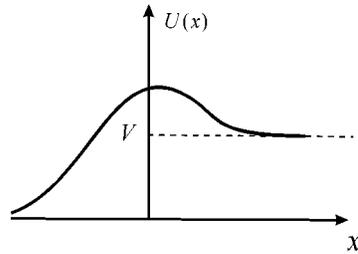


Рис. 2: Потенциальная энергия для случая одномерного рассеяния

формулируется так. Слева имеется падающая и отраженная волна, справа — прошедшая. Асимптотики волновой функции таковы:

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

Плотности  $x$ -компонент тока равны:

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

Коэффициенты прохождения  $D$  и отражения  $R$  равны:

$$D = \frac{j_{\text{прош}}}{j_{\text{пад}}} = \frac{k_1}{k} |B|^2; \quad R = \frac{|j_{\text{отр}}|}{j_{\text{пад}}} = |A|^2; \quad R + D = 1.$$

Оптический аналог — отражение света при нормальном падении на плоскую границу раздела двух сред. В оптике волновой вектор

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

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

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

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

Здесь оптический аналог — полное внутреннее отражение.

## ВОПРОСЫ

**9.1.** Частица находится в поле  $U(x) = -G\delta(x)$ . При  $t = 0$  волновая функция имеет вид  $\psi(x, 0) = e^{-|x|/b} / \sqrt{b}$ . Найти вероятность того, что при  $t \rightarrow \infty$  частица окажется в основном состоянии  $\psi_0(x)$ .

**9.2.** Тот же вопрос для гармонического осциллятора при

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

**9.3.** Найти функцию Грина для свободной частицы.

**9.4.** Найти  $D$  и  $R$  для частицы в поле рис. 3

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

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

**9.5.** Найти  $D$  для частицы в поле прямоугольной потенциальной ямы глубины  $V$  и ширины  $a$  (рис. 4). Дать график  $D(E)$ , указать условие прозрачности. Указать необходимое условие прозрачности в случае поля рис. 5:

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

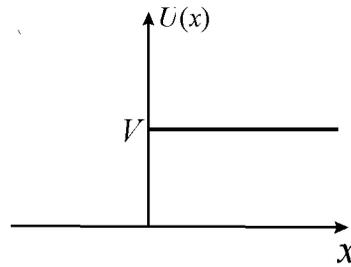


Рис. 3: Потенциальная “ступенька”

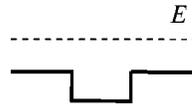


Рис. 4: Прохождение частицы над одномерной прямоугольной ямой

соответствующего при  $V_1 < V_2$  просветленной оптике.

**9.6.** Найти  $D(E)$  для частицы в поле прямоугольного потенциального барьера высотой  $V$  и шириной  $a$  (рис. 6), особо рассмотреть случай  $E < V$ ,  $ka \gg 1$ .

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

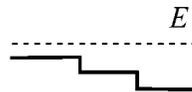


Рис. 5: Потенциальная энергия, соответствующая случаю просветленной оптики

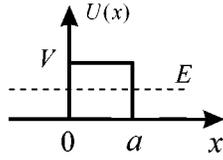


Рис. 6: Туннелирование частицы через одномерный прямоугольный барьер

## §10. Коммутаторы.

### Снова соотношение неопределенностей.

### Уравнение Эренфеста. Теорема о вириале

#### Измеримость величин

Если величины  $A$  и  $B$  одновременно измеримы, то существует полная система волновых функций  $\psi_n$ , таких, что  $\psi_n$  — одновременно собственная функция и  $\hat{A}$ , и  $\hat{B}$ . Но тогда

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

то есть

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

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

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

тогда

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

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

Рассмотрите также случай  $a = b = 0$ .

## Соотношение неопределенностей

Определим дисперсию

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

Пусть эрмитовы операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  не коммутируют,  $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$  и для простоты  $\langle n|\hat{A}|n\rangle = \langle n|\hat{B}|n\rangle = 0$ . Рассмотрим состояние

$$|m\rangle = (\alpha\hat{A} + i\hat{B})|n\rangle.$$

Ясно, что

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

Отсюда следует, что  $\Delta A^2 \cdot \Delta B^2 \geq \frac{1}{4}\langle C\rangle^2$ . Таким образом,

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

## Квантовые скобки Пуассона

Оператор производной по времени  $\frac{d\hat{A}}{dt}$ , по определению, удовлетворяет условию

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

Используя УШ, правую часть этого равенства можно переписать в виде

$$\frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial t} | \hat{A} | \psi \right\rangle + \left\langle \psi \left| \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right| \psi \right\rangle + \left\langle \psi | \hat{A} \left| \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \psi \left| \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}\hat{H}] \right| \psi \right\rangle.$$

Таким образом,

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

Квантовый аналог скобки Пуассона  $\{H, A\}$  выражается через коммутатор:

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

Покажите, что

$$\frac{d}{dt} \hat{p}_x = -\frac{\partial U}{\partial x}.$$

Отсюда следует **теорема Эренфеста**

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

Обсудите ее соотношение со вторым законом Ньютона.

### Теорема о вириале

Предварительные полезные соотношения:

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

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

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

В частности,

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

Таким образом,

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

Величина  $\mathbf{r} \nabla U$  называется вириалом данной механической системы.

Если потенциальная энергия — однородная функция координат, то есть если  $U(\lambda \mathbf{r}) = \lambda^k U(\mathbf{r})$ , то, по теореме Эйлера об однородных функциях,  $\mathbf{r} \nabla U = kU$ , или

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

### Примеры

Для гармонического осциллятора  $k = 2$ , поэтому

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

Для атома водорода  $k = -1$ , поэтому

$$\left\langle n \left| \frac{e^2}{r} \right| n \right\rangle = \left\langle n \left| \frac{\hat{p}^2}{m} \right| n \right\rangle = -2E_n. \quad (10.1)$$

## ВОПРОСЫ

**10.1.** Объясните, почему теорема о вириале не имеет места для инфинитного движения.

**10.2.** Найти соотношение неопределенностей для  $\Delta x$  и  $\Delta K$ , для  $\Delta U$  и  $\Delta K$ , где  $K = p^2/(2m)$ .

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

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

## §11. Оператор сдвига. Теорема Блоха

Оператор сдвига  $\hat{T}_a$  определяется соотношением

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

Так как

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

то оператор сдвига может быть выражен через оператор импульса

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

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

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

то есть оператор импульса  $\hat{p}_x$  является инфинитезимальным оператором для сдвига вдоль оси  $x$ .

Оператор сдвига неэрмитов:

$$\int \psi_1^*(x)\psi_2(x+a) dx \neq \int \psi_1^*(x+a)\psi_2(x) dx .$$

Для свободной частицы  $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$  и  $[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0$ , потому  $\hat{H}$  и  $\hat{T}_a$  имеют совместные собственные функции  $\psi_{E\lambda}(x) = A e^{ikx}$  с собственными значениями  $E = \hbar^2 k^2/(2m)$  и  $\lambda = e^{ika}$ . Импульс тоже коммутирует с  $\hat{H}$  и  $\hat{T}_a$  и имеет в этом состоянии собственное значение  $\hbar k$ .

Если потенциал периодический,  $U(x+a) = U(x)$ , то  $[\hat{H}, \hat{T}_a] = 0$ . В таком поле собственные функции стационарных состояний могут быть выбраны в таком виде,  $\psi_{E\lambda}(x)$ , что они одновременно являются собственными функциями оператора сдвига:

$$\hat{H} \psi_{E\lambda} = E \psi_{E\lambda}, \quad \hat{T}_a \psi_{E\lambda} = \lambda \psi_{E\lambda} .$$

Если потребовать, чтобы  $\psi_{E\lambda}(x)$  была конечной при  $x \rightarrow \pm\infty$ , то из соотношения

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

следует  $|\lambda| = 1$ , то есть  $\lambda$  можно представить в виде

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

Величину  $\hbar q$  в этом случае называют **квазиимпульсом**. Конечно, истинный импульс не сохраняется в периодическом поле, так как  $[\hat{H}, \hat{p}] \neq 0$ .

Если такое решение переписать в виде

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

то из

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

следует периодичность функции  $u_q(x)$ :  $u_q(x+a) = u_q(x)$ . Это утверждение называется теоремой Блоха.

## ВОПРОСЫ

**11.1.** Для свободного движения  $\psi(x) = A \cos(x/b)$  является собственной функцией  $\hat{H}$ , но не  $\hat{T}_a$  и  $\hat{p}$ , хотя  $[\hat{H}, \hat{T}_a] = [\hat{H}, \hat{p}] = 0$ . Почему?

**11.2.** Рассматривается движение частицы с  $E < 0$  в поле

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

Покажите, что волновая функция, определенная соотношениями

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

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

является собственной функцией  $\hat{H}$  и  $\hat{T}_a$  с собственными значениями

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

Найдите связь между  $E$  и  $\lambda$  из условия сшивки  $\psi'/\psi$  при  $x = 0$ .

При  $\kappa_0 = mGa/\hbar^2 \gg 1$  разрешите это уравнение и найдите в явном виде зависимость  $E$  от  $q$ . Представив при малых  $q$  эту зависимость в виде

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

найдите  $m_{\text{эф}}$ . Найдите плотность тока  $j_x$  и покажите, что одному значению  $E$  при разных значениях  $q$  соответствуют разные  $j_x$ .

Как ведет себя классическая частица в данном поле?

Повторите это рассмотрение для  $E > 0$ .

## §12. Квазиклассическое приближение

Подставив в УШ

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

волновую функцию в виде

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

получим

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

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

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

Таким образом, переход к классике происходит, когда

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

где  $\lambda(x) = 2\pi\hbar/p(x)$ . Иначе,

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

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

Другая форма критерия — великость классического действия по сравнению с квантом действия

$$\left| \int p(x) dx \right| \gg \hbar.$$

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

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

В классической механике плотность вероятности

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

В квантовой механике при  $U(x) = \text{const}$  точное решение УШ имеет вид  $\psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$ , где  $\hbar k = p$ . Естественно ожидать, что для движения частицы в достаточно плавно изменяющемся поле приближенное решение выглядит так:

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

$$\hbar k(x) = p(x) = \sqrt{2m[E - U(x)]}. \quad (12.1)$$

Чтобы показать это, подставим

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

в УШ и удержим члены первого порядка по  $\hbar$ :

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

Отсюда

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

то есть

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

что и приводит к (12.1). В классически недоступной области

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

$$\hbar \kappa(x) = \sqrt{2m[U(x) - E]}. \quad (12.2)$$

### Правила квантования Бора-Зоммерфельда

Рассмотрим движение частицы в квазиклассическом поле вида рис. 7. В квазиклассическом приближении волновая функция связанного состояния при  $x < a$  (область  $A$  на рис. 7) — это волна, затухающая при  $x \rightarrow -\infty$ :

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

при  $x > b$  (область  $C$  на рис. 7), аналогично,

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

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

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

Правила сшивки при переходе точки поворота  $a$  (идею сшивки можно найти, например, в книге Давыдова А.С. Квантовая механика (М.: Наука, 1973; §23) таковы:

$$A = \frac{1}{2}B, \quad \alpha = \frac{\pi}{4}.$$

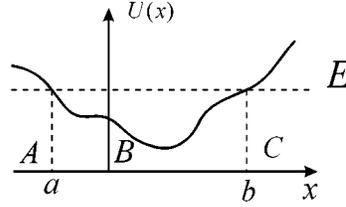


Рис. 7: Квазиклассическая потенциальная яма

Переписав  $\psi_B$  в виде

$$\psi_B(x) = -\frac{B}{\sqrt{k}} \sin \left( \int_x^b k dx + \frac{\pi}{4} - \beta \right),$$

где

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

и применив сшивку в точке  $b$ , находим

$$C = (-1)^n \frac{1}{2} B, \quad \beta = (n+1)\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Таким образом, получаем правило квантования:

$$\oint p(x) dx = 2 \int_a^b \sqrt{2m[E_n - U(x)]} dx = 2\pi\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

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

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

так что волновая функция, отвечающая уровню  $E_n$ , имеет, в соответствии с осцилляционной теоремой,  $n$  узлов.

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

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

**Нормировка** волновой функции:

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

где

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

— классический период колебаний. Отсюда

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

В квазиклассике  $n \gg 1$ , так что  $E_{n+\Delta n} - E_n \approx (dE_n/dn) \Delta n$ . Про- дифференцируем по  $n$  правило квантования

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

Отсюда разность соседних уровней (при  $\Delta n = 1$ ) составляет

$$E_{n+1} - E_n \approx \frac{dE_n}{dn} \Delta n = \frac{2\pi\hbar}{T_{\text{класс}}} \cdot 1 = \hbar\omega.$$

Иными словами, **в каждом небольшом участке квазиклассиче- ской части спектра уровни эквидистантны.**

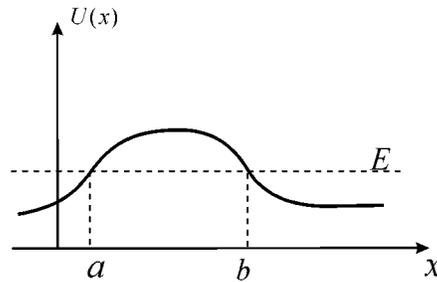


Рис. 8: Квазиклассический барьер

### Подбарьерное прохождение

Для прямоугольного барьера рис. 6 коэффициент прохождения  $D \approx \exp(-2\kappa a)$ . Отсюда для плавного барьера рис. 8 находим

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

Критерий применимости этой формулы обычный:

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

## Двойная яма

См. КМ, задача 3 к §50. Дополнительно покажите, что если  $\psi(x, t = 0) = \psi_0(x)$  (частица в начальный момент в правой яме), то

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

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

## ВОПРОСЫ

**12.1.** Получить квазиклассическое выражение для уровней энергии частицы в однородном поле тяжести в случае, когда ее движение ограничено снизу идеально отражающей плоскостью. Указать условие применимости полученного результата (задачи 9.2 и 9.3 ГКК).

**12.2.** Задача 2.4 ГКК. Для частицы, находящейся в поле

$$U(x) = U_0|x/a|^\nu; \quad U_0 > 0, \quad \nu > 0,$$

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

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

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

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

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

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

## §13. Квазистационарные состояния. $\alpha$ -распад

Возбужденные состояния квантовых систем нестационарны, распадаются — элементарное излучение ядер, атомов, молекул, радиоактивный распад ядер и т.д. Закон распада: число распавшихся за

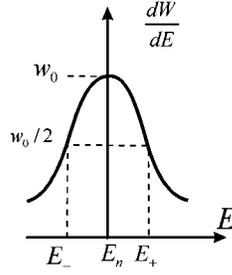


Рис. 9: Распределение по энергии для квазистационарного состояния. Здесь  $w_0 = 2/(\pi\Gamma)$  и  $E_{\pm} = E_n \pm \frac{1}{2}\Gamma$

время  $dt$  частиц  $dN(t)$  пропорционально числу имеющих в данный момент  $N(t)$  и интервалу времени  $dt$ , то есть

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

откуда получаем

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

**Определения: время жизни**

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

**ширина квазиуровня**

$$\Gamma = \hbar\gamma.$$

Вероятность в единицу времени для каждого атома или ядра остаться в возбужденном состоянии

$$\frac{dW}{dt} = -\frac{\dot{N}}{N}.$$

**Модель**

$$\frac{dW}{dt} = |\psi(r, t)|^2, \quad \psi \sim \exp\left[-\frac{iE_n t}{\hbar} - \frac{\Gamma t}{2\hbar}\right].$$

Вычислив спектральный состав состояния

$$\psi(\omega) = \int \psi(t) \frac{e^{i\omega t}}{\sqrt{2\pi}} dt,$$

получим (см. рис. 9)

$$\frac{dW}{dE} = \frac{\Gamma}{2\pi[(E - E_n)^2 + (\Gamma/2)^2]},$$

то есть у квазистационарного состояния  $\Delta E \sim \Gamma$ . При  $\Gamma \rightarrow 0$  имеем  $dW/dE \rightarrow \delta(E - E_n)$  и состояние переходит в стационарное.

## Модель $\alpha$ -распада

Пусть  $\alpha$ -частица движется в потенциальном поле вида рис. 10, где на малых расстояниях действуют притягивающие ядерные силы, а на больших расстояниях — кулоновское отталкивание. При  $b \rightarrow \infty$

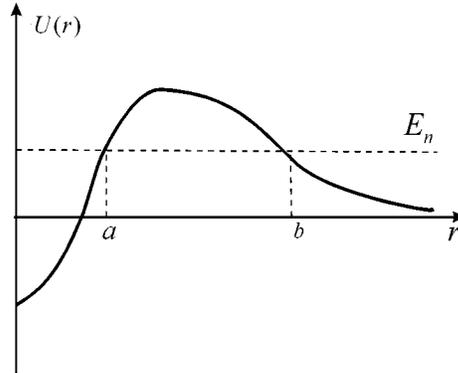


Рис. 10: Потенциальная энергия, соответствующая случаю  $\alpha$ -распада

уровень  $E_n$  — обычное стационарное состояние с  $\Gamma = 0$ . Конечность барьера приводит к конечному времени жизни  $\tau$  и  $\Delta E \sim \Gamma$ . Оценка

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

где

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

Постановка задачи с начальным условием. Постановка квазистационарной задачи с  $\psi(r \rightarrow \infty) \propto e^{ikr}$ .

## ВОПРОСЫ

**13.1.** “Пожалуй самым ярким и удивительным свойством  $\alpha$ -распада является очень сильная зависимость периода полураспада  $T_{1/2}$  от энергии вылетающих  $\alpha$ -частиц  $E$ ” (Широков Ю.М., Юдин Н.П. Ядер-

ная физика (М.: Наука, 1972 . С. 208). Эта зависимость (эмпирический закон Гейгера–Неттола) имеет вид

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

где  $A$  и  $B$  — константы, слабо зависящие от заряда ядра  $Z$  (для  $Z = 90$  известно  $A = -51,94$ ;  $B = 139,4$  МэВ<sup>1/2</sup>, если  $T_{1/2}$  в секундах).

Показать, что для  $\alpha$ -частиц, движущихся в модельном потенциале

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

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

**13.2.** Найти положение и ширину квазиуровней в поле

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

Специально обсудить случай малопроницаемого барьера  $G \gg \hbar^2/(ma)$  (ср. с задачей 4.56 ГКК).

## §14. Момент импульса

### Сдвиг и поворот

Сдвиг на расстояние  $a$  и поворот на угол  $\alpha = \alpha n$ , где  $n$  — произвольный фиксированный единичный вектор, имеют ряд общих черт. Пусть при таком повороте радиус-вектор  $r$  переходит в  $r'$ .

В §11 было показано, что оператор сдвига, определенный как  $\hat{T}_a \psi(r) \equiv \psi(r+a)$ , связан с оператором импульса  $\hat{p}$  соотношением  $\hat{T}_a = \exp(ia\hat{p}/\hbar)$ .

Совершенно аналогично можно показать, что оператор поворота, определенный как  $\hat{R}_\alpha \psi(r) \equiv \psi(r')$ , связан с оператором момента импульса  $\hat{M} = r \times \hat{p}$  соотношением  $\hat{R}_\alpha = \exp(i\alpha\hat{M}/\hbar)$ .

Собственная функция оператора  $\hat{p}_z = -i\hbar\partial/\partial z$  равна  $\psi_k(z) = e^{ikz}/\sqrt{2\pi}$  и соответствует собственному значению  $\hbar k$ . Аналогично, собственная функция оператора  $\hat{M}_z = -i\hbar\partial/\partial\varphi$ , где  $\varphi$  — азимутальный угол в сферических координатах, равна  $\Phi_m(\varphi) = A e^{im\varphi}$  и соответствует собственному значению  $\hbar m$ . На этом, однако, аналогия между сдвигом и поворотом кончается.

Собственная функция оператора  $\hat{p}_z$  определена на всей прямой,  $-\infty < z < +\infty$ , спектр оператора импульса непрерывный, а его собственные функции нормированы на  $\delta$ -функцию:  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_k(z)^* \psi_{k'}(z) dz = \delta(k - k')$ . Собственная функция оператора  $\hat{M}_z$  определена в ограниченной области,  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ , требование однозначности  $\Phi_m(\varphi + 2\pi) = \Phi_m(\varphi)$  приводит к дискретному спектру  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Ортонормированная система собственных функций оператора  $\hat{M}_z$  такова:

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad \int_0^{2\pi} \Phi_{m'}^*(\varphi) \Phi_m(\varphi) d\varphi = \delta_{mm'}. \quad (14.1)$$

Далее, различные компоненты оператора импульса коммутируют друг с другом, плоская волна  $\psi_k(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} / (2\pi)^{3/2}$  представляет собой совместную собственную функцию операторов  $\hat{p}_x$ ,  $\hat{p}_y$  и  $\hat{p}_z$ . Напротив, различные компоненты оператора момента импульса не коммутируют друг с другом. Введем безразмерный оператор

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

Нетрудно показать, что

$$[\hat{l}_j, \hat{l}_k] = i\varepsilon_{jks}\hat{l}_s, \quad [\hat{l}_j, \hat{l}^2] = 0. \quad (14.2)$$

Отсюда видно, что можно искать совместные собственные функции операторов  $\hat{l}_x$  и  $\hat{l}^2$  или операторов  $\hat{l}_z$  и  $\hat{l}^2$ :

$$\hat{l}^2 \psi_{\lambda m} = \lambda \psi_{\lambda m}, \quad \hat{l}_z \psi_{\lambda m} = m \psi_{\lambda m}. \quad (14.3)$$

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

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

$$\hat{l}_z \hat{l}_{\pm} = \hat{l}_{\pm} (\hat{l}_z \pm 1), \quad (14.4)$$

$$[\hat{l}_{\pm}, \hat{l}^2] = 0, \quad (14.5)$$

$$\hat{l}^2 = \hat{l}_+ \hat{l}_- + \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z = \hat{l}_- \hat{l}_+ + \hat{l}_z^2 + \hat{l}_z. \quad (14.6)$$

Соотношение (14.4) между оператором  $\hat{l}_z$  и операторами  $\hat{l}_+$  и  $\hat{l}_-$  аналогично соотношениям (7.1) между оператором  $\hat{H}$  и повышающим

$\hat{a}^+$  и понижающим  $\hat{a}$  операторами для осциллятора. Поэтому операторы  $\hat{l}_+$  и  $\hat{l}_-$  будут играть роль повышающих и понижающих операторов для состояний с определенным значением  $\hat{l}_z$ . Действительно, из (14.4–5) следует

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

то есть

$$\hat{l}_\pm \psi_{\lambda m} = \lambda m \psi_{\lambda m \pm 1}. \quad (14.7)$$

Поскольку  $\langle \hat{l}_z^2 \rangle \leq \langle \hat{l}^2 \rangle$ , то при заданном  $\lambda$  существует максимальное значение  $m$ , обозначим его  $m_{\max} = l$ . Ясно, что  $\hat{l}_+ \psi_{\lambda l} = 0$ , отсюда с учетом (14.6) получаем

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

или

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

Применяя  $n$  раз понижающий оператор  $\hat{l}_-$  к состоянию с наибольшим  $m_{\max} = l$ , мы получим  $(\hat{l}_-)^n \psi_{\lambda l} \propto \psi_{\lambda l-n}$ . Увеличивая  $n$ , мы придем к наименьшему значению  $m_{\min} = -l$ , в этом случае  $l - n = -l$ , то есть

$$2l \text{ — целое число.} \quad (14.8)$$

Найдем матричные элементы операторов  $\hat{l}_\pm$ . Будем обозначать состояние  $\psi_{\lambda m}$  с  $\lambda = l(l + 1)$  как  $|lm\rangle$  и усредним (14.6) по этому состоянию, тогда

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

то есть

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

Отсюда следует, что

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

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

Полученные формулы определяют также и коэффициенты  $C$  в соотношении (14.7)

$$\hat{l}_+ |lm\rangle = \sqrt{(l + m + 1)(l - m)} |lm + 1\rangle,$$

$$\hat{l}_- |lm\rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)} |lm-1\rangle. \quad (14.9)$$

В заключение этого раздела укажем, что нетрудно проверить следующие обобщение коммутационных соотношений (14.2):

$$[\hat{l}_j, \hat{A}_k] = i\varepsilon_{jks} \hat{A}_s, \quad [\hat{l}_j, \hat{A}^2] = 0, \quad (14.10)$$

где  $\hat{A} = \mathbf{r}$ , или  $\hat{\mathbf{p}}$ , или  $\hat{\mathbf{l}}$  или векторная функция вида

$$\mathbf{A} = r f_1 + \hat{\mathbf{p}} f_2 + \hat{\mathbf{l}} f_3, \quad f_j \equiv f_j(r^2, \hat{\mathbf{p}}^2, r\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}r).$$

## Сферические функции

Для получения конкретного вида собственных функций удобно использовать сферические координаты, в которых

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \hat{l}_{\pm} = e^{\pm i\varphi} \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right),$$

$$\hat{l}^2 = - \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right].$$

Совместные собственные функции операторов  $\hat{l}^2$  и  $\hat{l}_z$  удобно искать в виде  $Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi)$ , где функция  $\Phi_m(\varphi)$  определена в (14.1) с  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$ . Для нахождения функции  $\Theta_{lm}(\theta)$  можно использовать такой прием. Условие  $\hat{l}_+ Y_{ll} = 0$  приводит к уравнению

$$\left( \frac{d}{d\theta} - l \operatorname{ctg} \theta \right) \Theta_{ll}(\theta) = 0,$$

откуда получаем  $Y_{ll} = \operatorname{const} e^{il\varphi} \sin^l \theta$ . Последовательно применяя понижающий оператор в соответствии с (14.9), получим сферические функции

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi},$$

где  $P_l^m(x)$  — присоединенные полиномы Лежандра. Сферические функции образуют ортонормированную систему

$$\int Y_{l'm'}^* Y_{lm} d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}.$$

**Отражение** системы координат  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$  в сферических координатах выглядит так:  $r \rightarrow r, \theta \rightarrow \pi - \theta, \varphi \rightarrow \varphi + \pi$ . При этом

$$Y_{lm}(-\mathbf{n}) = (-1)^l Y_{lm}(\mathbf{n}).$$

## Примеры

$$Y_{00} = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}, \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} n_z,$$
$$Y_{1\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi} = \pm \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (n_x \pm i n_y).$$

## ВОПРОСЫ

**14.1.** В состоянии частицы, заданном волновой функцией  $\psi = A \cos^2 \varphi$ , найти вероятности различных значений  $m$  проекции момента на ось  $z$  и  $\langle l_z \rangle$ . То же для  $\psi = A e^{i\varphi} \cos^2 \varphi$ .

**14.2.** Обсудить вопрос о том, куда направлен вектор  $\langle \psi | \hat{l} | \psi \rangle$  в состояниях  $\psi = Y_{ll}$  и  $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{l1} + Y_{l-1})$ . Показать, что в состоянии  $\psi_m$  с определенной проекцией момента  $m$  на ось  $z$  средние значения  $\langle l_x \rangle = \langle l_y \rangle = 0$ .

**14.3.** Исследовать качественно угловое распределение плотности вероятности для состояний, описываемых сферическими функциями  $Y_{l,m=l}$  и  $Y_{l,m=0}$ , считая  $l \gg 1$ .

**14.4.** Указать, при каких  $m$  и  $m'$  могут быть отличны от нуля матричные элементы дипольного  $\langle m' | x_i | m \rangle$  и квадрупольного  $\langle m' | x_i x_j - (1/3)\delta_{ij}r^2 | m \rangle$  моментов.

**14.5.** Частица находится в состоянии с моментом  $l = 1$  и его проекцией  $m$  ( $m = 0, \pm 1$ ) на ось  $z$ . Найти вероятности  $W(m', m)$  различных значений проекции момента  $m'$  на ось  $z'$ , составляющую угол  $\alpha$  с осью  $z$ . Рассмотреть, в частности, случай, когда ось  $z'$  перпендикулярна оси  $z$  (задача 3.24 ГКК).

## §15. Центральное поле

Для центрального поля удобны сферические координаты. УШ в них имеет вид

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 \hat{l}^2}{2mr^2} + U(r) \right] \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi).$$

Его можно легко получить, используя тождество

$$\frac{\hbar^2 \hat{l}^2}{r^2} = -[\hat{p} \times \mathbf{r}] \frac{1}{r^2} [\mathbf{r} \times \hat{p}] = \hat{p}^2 - (\hat{p} \cdot \mathbf{r}) \frac{1}{r^2} (\mathbf{r} \cdot \hat{p})$$

Разделяя переменные  $\psi = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ , получим для радиальной функции уравнение

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + U_{\text{эф}}(r) \right] R_l = E_l R_l, \quad U_{\text{эф}} = U(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}.$$

От первой производной по  $r$  можно избавиться заменой  $R_l = \chi_l/r$ . Для  $\chi_l(r)$  получаем обычное одномерное уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \chi_l'' + U_{\text{эф}}(r) \chi_l = E_l \chi_l,$$

но с эффективным потенциалом  $U_{\text{эф}}(r)$ , зависящим от  $l$ . Из того, что  $R_l(r)$  конечно в нуле, следует  $\chi_l(0) = 0$ . Условие нормировки таково:

$$\int_0^\infty |\chi_l(r)|^2 dr = 1.$$

**Терминология.**  $l = 0, 1, 2, 3, \dots (s, p, d, f, \dots)$  — азимутальное,  $m$  — магнитное квантовые числа. Радиальное квантовое число  $n_r$  равняется числу узлов функции  $\chi_l(r)$  (кроме точек  $r = 0$  и  $r = \infty$ ).

*Поведение при  $r \rightarrow 0$ .* Пусть  $r^2 U(r) \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow 0$ , тогда решениями уравнения

$$\chi_l'' = \frac{l(l+1)}{r^2} \chi_l$$

служат

$$\chi_l = ar^{l+1} \quad (\text{то есть } R_l = ar^l) \quad \text{и} \quad \chi_l = \frac{b}{r^l} \quad (\text{то есть } R_l = \frac{b}{r^{l+1}}).$$

Второе решение сингулярно и поэтому не годится. Отметим, что  $\psi(0) \neq 0$  лишь для  $l = 0$ .

*Поведение при  $r \rightarrow \infty$ .* Считая, что поле убывает достаточно быстро, получим

$$\chi_l'' = -\frac{2mE}{\hbar^2} \chi_l,$$

так что

$$\chi_l \propto \begin{cases} e^{\pm ikr} & \text{или } \sin(kr + \alpha_l) & \text{при } E > 0, \\ e^{-\kappa r} & & \text{при } E < 0. \end{cases}$$

## Свободное движение

При  $l = 0$  решением уравнения  $\chi'' + k^2\chi = 0$  с граничным условием  $\chi(0) = 0$  служит

$$\chi_{k0}(r) = A \sin kr.$$

Нормировка на  $\delta$ -функцию “по шкале  $k$ ”:

$$\begin{aligned} \delta(k - k') &= \int_0^\infty \chi_{k'} \chi_k dr = -\frac{A}{4} \int_0^\infty [e^{i(k+k')r} + e^{-i(k+k')r} - (k \rightarrow -k)] dr = \\ &= -\frac{A^2}{4} \int_{-\infty}^\infty e^{i(k+k')r} dr + (k \rightarrow -k) = -\frac{A^2}{4} [2\pi \delta(k + k') - 2\pi \delta(k - k')] ; \end{aligned}$$

отсюда следует

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

В итоге

$$\chi_{k0} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin kr.$$

Можно показать (см. КМ § 33), что при  $l > 0$

$$\chi_{kl}(r) = \frac{r^{l+1}}{k^l} \left( -\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \right)^l \frac{\chi_{k0}(r)}{r} = \sqrt{kr} J_{l+1/2}(kr);$$

отсюда

$$\chi_{kl}(r) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \begin{cases} \frac{(kr)^{l+1}}{(2l+1)!!} & \text{при } r \rightarrow 0, \\ \sin \left( kr - \frac{\pi l}{2} \right) & \text{при } r \rightarrow \infty. \end{cases}$$

Если поле убывает при  $r \rightarrow \infty$  достаточно быстро, то при  $E > 0$  и больших  $r$  движение становится свободным, поэтому

$$\chi_{kl}(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \left( kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right);$$

здесь  $\delta_l$  — так называемая фаза рассеяния.

## ВОПРОСЫ

**15.1.** Показать, что задача 1 из § 33 КМ сводится к вопросу 5.1.

**15.2.** Задача 3 из того же § 33.

**15.3.** Задача 4.20 ГКК. Как меняются значения  $E_{n_r, l}$  энергетических уровней частицы в дискретном спектре:

- а) при фиксированном значении  $l$  с увеличением  $n_r$ ;  
 б) при фиксированном значении  $n_r$  с увеличением  $l$ ?

**15.4.** Задача 4.21 ГКК. Для частицы, находящейся в центральном поле,

- а) могут ли быть двукратно вырожденные уровни;  
 б) какую кратность вырождения может иметь первый возбужденный уровень?

**15.5.** Задачи 4.23 ГКК и 4.24 ГКК. Найти уровни энергии и нормированные волновые функции стационарных состояний сферического осциллятора  $U(r) = kr^2/2$ , используя декартовы координаты. Определить кратность вырождения уровней.

Произвести классификацию четырех нижних уровней осциллятора по  $n_r$ ,  $l$  и четности, исходя только из известного значения кратности вырождения уровней.

Какая комбинация волновых функций  $\psi_{n_1 n_2 n_3}$  отвечает состоянию осциллятора с моментом  $l = 0$  (при  $N = n_1 + n_2 + n_3 = 2$ )?

## §16. Атом водорода

Задача сводится к движению частицы приведенной массы  $m = m_e m_p / (m_e + m_p)$  в поле  $U = -e^2/r$ , ниже рассматривается только случай  $E < 0$  (связанные состояния). Естественная система единиц включает  $\hbar$ ,  $e$ ,  $m$ . Из них строятся единицы длины (боровский радиус)

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0,53 \cdot 10^{-8} \text{ см},$$

энергии (удвоенный Ридберг)

$$E_{\text{ат}} = \frac{me^4}{\hbar^2} = 27,2 \text{ эВ} = 2 \text{ Ry},$$

времени

$$t_{\text{ат}} = \frac{\hbar^3}{me^4} = 2,4 \cdot 10^{-17} \text{ с},$$

скорости

$$v_{\text{ат}} = \frac{e^2}{\hbar} = \alpha c,$$

где

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

— так называемая постоянная тонкой структуры. (Найдите единицы импульса, силы, напряженности электрического и магнитного полей.) Переходя к безразмерным величинам  $r' = r/a_{\text{в}}$ ,  $E' = E/E_{\text{ат}}$ , получим УШ в виде

$$\frac{d^2\chi_l}{dr'^2} + \left[ 2E' + \frac{2}{r'} - \frac{l(l+1)}{r'^2} \right] \chi_l = 0.$$

В дальнейшем штрихи опускаем.

Мы знаем, что  $\chi_l \sim r^{l+1}$  при  $r \rightarrow 0$  и  $\chi_l \sim e^{-\kappa r}$  при  $r \rightarrow \infty$  (здесь  $\kappa = \sqrt{-2E}$ ). Поэтому ищем решение в виде

$$\chi_l = r^{l+1} e^{-\kappa r} w(r).$$

Для  $w(r)$  получаем уравнение

$$r w'' + 2(l+1 - \kappa r) w' + 2(1 - \kappa - \kappa l) w = 0.$$

Его решение ищем в виде ряда  $w = \sum_{s=0}^{\infty} a_s r^s$ . Рекуррентное соотношение для коэффициентов таково:

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

Из него получаем

$$a_{s+1} \rightarrow \frac{2\kappa}{s+1} a_s \text{ при } s \rightarrow \infty.$$

Таким образом,  $a_s \approx (2\kappa)^2/s!$  и, если ряд не оборвать, он сходится к  $w \sim e^{2\kappa r}$  при  $r \rightarrow \infty$ . Чтобы  $\chi_l(r) \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$ , необходимо оборвать ряд на некотором  $s = n_r$ . При этом  $\kappa(n_r + l + 1) - 1 = 0$  и  $w(r) = L_{n_r}(r)$  — полином степени  $n_r$ , имеющий  $n_r$  узлов (он сводится к полиному Лагерра). В итоге,

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}, \quad \psi_{nlm} = R_{lm}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad R_{nl} = r^l e^{-r/n} L_{n_r}(r),$$

$$n = n_r + l + 1 = 1, 2, 3, \dots, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots, \quad l = 0, 1, \dots, n - 1.$$

**Кулоновское вырождение.** Уровню  $E_n$  с данным главным квантовым числом  $n$  соответствует

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2$$

различных состояний (различных волновых функций).

Состояния с  $l = n - 1$ . Для них  $n_r = 0$  и  $L_{n_r}(r)$  — просто константа, которую легко определить из условия нормировки, используя известный интеграл

$$\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x} dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}.$$

Таким образом, получим

$$R_{n,n-1} = r^{n-1} e^{-r/n} \sqrt{\frac{1}{(2n)!} \left(\frac{2}{n}\right)^{2n+1}}. \quad (16.1)$$

Отсюда найдем, что в данном состоянии

$$\langle r \rangle = n \left( n + \frac{1}{2} \right); \quad \frac{\Delta r}{\langle r \rangle} = \frac{1}{\sqrt{2n+1}}.$$

У основного  $1s$  состояния

$$\langle r \rangle = \frac{3}{2}, \quad \frac{\Delta r}{\langle r \rangle} = \frac{1}{\sqrt{3}} \approx 60\%.$$

Таким образом, здесь нет сходства с моделью Бора, для которой  $\langle r \rangle = 1$ ,  $\Delta r = 0$  (не говоря уже о том, что в  $1s$  состоянии момент  $M = 0$ , а в модели Бора в основном состоянии  $M = \hbar$ ).

При  $l = m = n - 1 \gg 1$ , напротив, квантовая механика дает ответ, близкий к боровской модели. А именно, средний радиус велик:  $\langle r \rangle \approx n^2$ , относительная дисперсия мала:  $\Delta r / \langle r \rangle \approx 1 / \sqrt{2n}$ , в угловом распределении  $|Y_{n-1,n-1}|^2 \propto \sin^{2n-2} \theta$  вероятность найти электрон сконцентрирована в узком интервале углов вблизи  $\theta = \pi/2$ , что очень похоже на классическую траекторию в форме окружности радиуса  $n^2$  в плоскости  $xy$ .

Первый возбужденный уровень  $n = 2$ . Волновая функция состояния  $2p$  с  $l = 1$  (см. (16.1))

$$R_{21} = \frac{r}{\sqrt{24}} e^{-r/2}$$

не имеет узлов. Для  $2s$  состояния рекуррентное соотношение дает  $a_1 = -\frac{1}{2}a_0$ , а условие нормировки  $a_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ , итого

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( 1 - \frac{1}{2} r \right) e^{-r/2},$$

имеется один узел при  $r = 2$ .

### Спектральные серии

$$\hbar\omega = \left( \frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) R_y, \quad n_i > n_f.$$

При  $n_f = 1$  возникает серия *Лаймана* в ультрафиолетовой области спектра; при  $n_f = 2$  – серия *Бальмера*, причем четыре линии  $H_\alpha$ ,  $H_\beta$ ,  $H_\gamma$ ,  $H_\delta$ , соответствующие  $n_i = 3, 4, 5, 6$ , лежат в видимой области спектра; при  $n_f \geq 3$  возникают серии в инфракрасной области спектра.

Водородоподобные атомы.

Возможные поправки к формуле Бора для  $E_n$ .

### ВОПРОСЫ

**16.1.** Для состояния  $1s$  атома водорода дать графики  $dW/d^3r$  и  $dW/dr$  в зависимости от  $r$ . Найти  $\varphi_{100}(p)$  и дать графики  $dW/d^3p$  и  $dW/dp$  в зависимости от  $p$ . Оценить  $\langle p \rangle$ ,  $\langle p^2 \rangle$  и  $\Delta p$ .

**16.2.** Найти  $R_{20}$  из условия ее ортогональности к  $R_{10}$ . Ортогональны ли  $R_{20}$  и  $R_{21}$ ?

**16.3.** Задача 2 из § 36 КМ. Оценить напряженность электрического поля атома водорода на расстоянии  $r = a_B$ .

**16.4.** Для  $2s$  и  $2p$  состояний атома водорода дать графики  $dW/d^3r$  в зависимости от  $r$  и  $\theta$ . Определить среднее магнитное поле, создаваемое электроном в центре атома водорода в состоянии  $2p$ .

**16.5.** Для того, чтобы учесть отсутствие случайного кулоновского выражения по  $l$  в спектрах водородоподобных атомов, можно попытаться использовать потенциал вида

$$U(r) = -\frac{Z_a e^2}{r} - \beta r_0 \frac{Z_a e^2}{r^2}, \quad r_0 = \frac{\hbar^2}{m Z_a e^2},$$

где второй член моделирует поляризуемость атомного остатка под действием валентного электрона. Найти уровни энергии в этом потенциале.

**16.6.** Найти вероятность того, что при  $\beta$ -распаде трития электрон останется в основном состоянии.

**16.7.** У волновой функции  $\psi = A\psi_{200} + B\psi_{210}$  определить коэффициенты  $A$  и  $B$ , дающие наибольшее среднее значение дипольного момента  $\langle \psi | er | \psi \rangle = d$ , и найти величину  $d$ .

**16.8.** Оценить размеры и уровни энергии водородоподобных атомов  $\text{He}^+$ ,  $\text{Li}^{++}$ ,  $e^+e^-$ ,  $\mu^-p$ ,  $\mu^-p^+$ ,  $\mu^-$  в поле ядра свинца  $\text{Pb}^{+82}$ .

## §17. Стационарная теория возмущений

Пусть некий гамильтониан  $\hat{H}$  можно представить в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V},$$

где для гамильтониана  $\hat{H}_0$  известны его собственные функции и собственные значения,  $\psi_n^0(x)$  и  $E_n^0$ ,

$$\hat{H}_0\psi_n^0 = E_n^0\psi_n^0,$$

а  $\hat{V}$  — малое возмущение. Рассмотрим, как под действием этого возмущения сдвигается  $n$ -й невырожденный уровень  $E_n^0$  и как изменяется волновая функция  $\psi_n^0(x)$ . Подставим  $\psi = \sum_m c_m \psi_m^0$  в уравнение  $(\hat{H}_0 + \hat{V})\psi = E\psi$ , домножим уравнение слева на  $(\psi_k^0)^*$  и проинтегрируем по  $x$ . Получим

$$(E - E_k^0) c_k = \sum_m V_{km} c_m. \quad (17.1)$$

Пусть

$$E = E_n^0 + E_n^1 + E_n^2 + \dots, \quad c_m = c_m^0 + c_m^1 + \dots$$

Так как  $\psi \rightarrow \psi_0$  при  $\hat{V} \rightarrow 0$ , то  $c_m^0 = 1$  при  $m = n$  и  $c_m^0 = 0$  при  $m \neq n$ , то есть  $c_m^0 = \delta_{mn}$ . Более того, из условия нормировки  $\int |\psi|^2 dx = 1$  имеем

$$\sum_m |c_m^0 + c_m^1 + \dots|^2 = 1 + 2\text{Re} c_n^1 + \dots = 1,$$

так что

$$c_n^1 = 0.$$

Таким образом, из (17.1) получаем

$$(E_n^0 - E_k^0 + E_n^1 + E_n^2 + \dots)(\delta_{kn} + c_k^1 + \dots) = \sum_m V_{km} (\delta_{mn} + c_m^1 + \dots).$$

В первом порядке при  $k = n$  отсюда следует  $E_n^1 = V_{nn}$ . При  $k \neq n$  получаем  $(E_n^0 - E_k^0) c_k^1 = V_{kn}$ , откуда

$$c_k^1 = \frac{V_{kn}}{E_n^0 - E_k^0} \text{ при } k \neq n.$$

Итак,

$$E_n^1 = V_{nn} = \langle \psi_n^0 | \hat{V} | \psi_n^0 \rangle, \quad \psi = \psi_n^0 + \sum_{m \neq n} \psi_m^0 \frac{V_{mn}}{E_n^0 - E_m^0}.$$

Критерий применимости:  $\psi$  должна мало отличаться от  $\psi_n^0$ , то есть

$$|V_{mn}| \ll |E_m^0 - E_n^0|.$$

Во втором порядке при  $k = n$  получаем

$$E_n^2 = \sum_m V_{nm} c_m^1 = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_n^0 - E_m^0}.$$

Отметим, что если поправка второго порядка к основному уровню отлична от нуля, то она отрицательна,  $E_n^2 \leq 0$ .

### Примеры

#### Производная от энергии по параметру

Пусть  $\hat{H}_0 = H(\lambda)$ , а  $\hat{H} = H(\lambda + \Delta\lambda) = \hat{H}_0 + \hat{V}$ , где

$$\hat{V} = \Delta\lambda \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda}.$$

В первом порядке поправка к энергии равна  $E_n^1 = \langle n | (\partial \hat{H} / \partial \lambda) \Delta\lambda | n \rangle$ . С другой стороны,  $E_n^1 = (\partial E_n / \partial \lambda) \Delta\lambda$ , поэтому

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle n \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} \right| n \right\rangle.$$

В частности, для центрального поля при  $\lambda \equiv l$

$$\hat{H}(l) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r),$$

и

$$\frac{\partial E_{n_r l}}{\partial l} = \left\langle n_r l \left| \frac{\partial H}{\partial l} \right| n_r l \right\rangle = \left\langle n_r l \left| \frac{\hbar^2 (2l+1)}{2mr^2} \right| n_r l \right\rangle.$$

Так как  $(\partial E_{n,l}/\partial l) > 0$ , то в центральном поле с ростом  $l$  (при фиксированном  $n_r$ ) энергии уровней растут, что вполне согласуется с классическими представлениями.

Для атома водорода

$$E_{n,l} = -\frac{me^4}{2\hbar^2(n_r + l + 1)^2}$$

и поэтому

$$\left\langle nl \left| \frac{1}{r^2} \right| nl \right\rangle = \frac{1}{a_B^2} \frac{1}{n^3(l + \frac{1}{2})}. \quad (17.2)$$

Если к кулоновскому полю  $U = -e^2/r$  есть малая поправка вида  $\beta/r^2$ , то энергия начинает зависеть не только от  $n$ , но и от  $l$ :

$$E_{nl} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} + \frac{\beta m^2 e^2}{\hbar^4 n^3(l + \frac{1}{2})}.$$

Обратим внимание на то, что в пределе больших квантовых чисел их полная степень в найденной поправке совпадает со степенью  $\hbar$ :  $\Delta E_{nl} \sim (\hbar^4 n^3 l)^{-1}$ . Так и должно быть для любого матричного элемента, имеющего классический предел.

## Поляризуемость

Для атома в слабом однородном электрическом поле  $\mathcal{E}$  возмущение  $\hat{V} = -d\mathcal{E}$ , где  $d = -e\sum_a r_a$  — дипольный момент атома (здесь сумма идет по координатам  $r_a$  всех электронов). В невырожденном состоянии  $\psi_n^0$  среднее значение  $\langle d \rangle = 0$ , так что  $E_n^1 = 0$  и

$$\Delta E_n = E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m | d \mathcal{E} | n \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \equiv -\frac{1}{2} \alpha_{ij} \mathcal{E}_i \mathcal{E}_j.$$

Отсюда тензор поляризуемости равен

$$\alpha_{ij} = 2 \sum_{m \neq n} \frac{\langle n | d_i | m \rangle \langle m | d_j | n \rangle}{E_m^0 - E_n^0}.$$

Пусть состояние атома сферически симметрично, тогда  $\alpha_{ij} = \alpha \delta_{ij}$  и

$$\alpha = 2 \sum_{m \neq n} \frac{\langle n | d_z | m \rangle \langle m | d_z | n \rangle}{E_m^0 - E_n^0}.$$

Очевидно, в основном состоянии  $\alpha > 0$ .

Оценим величину  $\alpha$  для основного состояния атома водорода. Для оценки снизу оставим в сумме по  $m$  лишь одно слагаемое  $|m\rangle \rightarrow |nlm\rangle = |210\rangle$ . Отсюда (в атомной системе единиц)

$$\alpha > 2 \frac{|\langle 100|z|210\rangle|^2}{-\frac{1}{8} + \frac{1}{2}} = \frac{2^{19}}{3^{11}} \approx 2,96.$$

Для оценки сверху заменим всюду  $E_m^0 - E_1^0 \rightarrow E_2^0 - E_1^0 = \frac{3}{8}$ . Тогда

$$\alpha < \frac{16}{3} \sum_m \langle 100|z|m\rangle \langle m|z|100\rangle = \frac{16}{3} \langle 100|z^2|100\rangle = \frac{16}{3} \approx 5,33.$$

Точное значение

$$\alpha = 4,5 a_B^3$$

(см. КМ задача 4 к § 76).

### Силы Ван-дер-Ваальса

На больших расстояниях  $R \gg a_B$  два атома в  $S$ -состояниях имеют диполь-дипольное взаимодействие

$$V = \frac{-3(d_{1n})(d_{2n}) + d_1 d_2}{R^3} = \frac{-2d_{1z}d_{2z} + d_{1x}d_{2x} + d_{1y}d_{2y}}{R^3}.$$

Поправка первого порядка по этому взаимодействию равна нулю для невырожденных состояний атомов. Поправка второго порядка имеет вид

$$U(R) = E_{00}^2 = -\frac{\beta}{R^6},$$

где

$$\beta = \sum_{n_1 n_2} \frac{\langle 0|V|n_1 n_2\rangle \langle n_1 n_2|V|0\rangle}{E_{n_1} + E_{n_2} - 2E_0} = 6 \sum_{n_1 n_2} \frac{|\langle 0|d_{1z}d_{2z}|n_1 n_2\rangle|^2}{E_{n_1} + E_{n_2} - 2E_0}.$$

Оценки  $\beta$  для атома водорода

$$\frac{2^{33}}{3^{20}} \approx 2,46 < \frac{\beta}{e^2 a_B^5} < 8.$$

Расчет дает

$$\beta = 6,5 e^2 a_B^5.$$

## §18. Стационарная теория возмущений при наличии вырождения

Пусть уровню  $E_n^0$  соответствуют  $s$  различных функций  $\varphi_1^0, \varphi_2^0, \dots, \varphi_s^0$ . Ищем решение в виде  $\varphi = \sum_{m=1}^s c_m \varphi_m^0$ , что приводит к уравнению

$$(E - E_n^0) c_k = \sum_{m=1}^s V_{km} c_m,$$

где  $V_{km} = \langle \varphi_k^0 | \hat{V} | \varphi_m^0 \rangle$  и все  $c_m$ , вообще говоря, не малы. Подставляя  $E = E_n^0 + E_n^1 + \dots$ , получим в первом порядке систему линейных однородных уравнений для определения  $c_m$ :

$$\sum_{m=1}^s (V_{km} - E_n^1 \delta_{km}) c_m = 0.$$

Эта система имеет нетривиальное решение, если

$$\det |V_{km} - E_n^1 \delta_{km}| = 0,$$

что дает, вообще говоря,  $s$  различных корней  $E_n^1(k)$ ,  $k = 1, 2, \dots, s$  и столько же независимых наборов  $c_m$ .

### Примеры

#### Двухуровневая система

##### Секулярное уравнение

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^1 & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E^1 \end{vmatrix} = 0$$

имеет корни

$$E^1 = \frac{1}{2} (V_{11} + V_{22}) \mp \frac{1}{2} \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}.$$

Расщепление уровней равно

$$\Delta E = \sqrt{(V_{11} - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}.$$

Пусть возмущение зависит от некоторого параметра  $\lambda$ . Можно ли, меняя  $\lambda$ , добиться того, чтобы уровни 1 и 2 пересеклись? Обращение  $\Delta E(\lambda)$  в нуль возможно лишь при условиях  $V_{11}(\lambda) = V_{22}(\lambda)$ ,  $V_{12}(\lambda) =$

0. Но это, по существу, два уравнения для одной переменной  $\lambda$ , которые, вообще говоря, несовместны. Нельзя совместить два уровня, меняя одну переменную. Это так называемая **теорема о непересечении уровней**. Очевидные исключения — случаи, когда  $V_{12}(\lambda)$  или  $V_{11}(\lambda) - V_{22}(\lambda)$  обращаются в нуль тождественно.

### Эффект Штарка для атома водорода при $n = 2$

Имеется 4 состояния:  $2s$ ;  $2p, m = +1$ ;  $2p, 0$ ;  $2p, -1$ . Возмущение  $V = e\mathcal{E}z$  сохраняет  $l_z$ . Значит, состояния  $2p, +1$  и  $2p, -1$  не смешиваются ни друг с другом, ни с остальными состояниями. Поэтому для них применима теория возмущений без вырождения, что дает

$$E^1 = \langle 2p, \pm 1 | V | 2p, \pm 1 \rangle = 0.$$

Остаются два состояния  $\varphi_1^0 = |2s\rangle$  и  $\varphi_2^0 = |2p, 0\rangle$ , для них  $V_{11} = V_{22} = 0$ ,  $V_{12} = V_{21} = 3e\mathcal{E}a$ . Отсюда получаем два решения

$$E^1 = \mp 3e\mathcal{E}a, \quad \psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s\rangle \mp |2p, 0\rangle).$$

## ВОПРОСЫ

**18.1.** Определить поправки к основному состоянию линейного осциллятора за счет малых ангармонических поправок  $V = \alpha x^3 + \beta x^4$ . Учесть члены первого порядка по  $\beta$  и второго по  $\alpha$ .

**18.2.** Вычислить поправку первого порядка к энергии основного состояния водородоподобного атома, обусловленную неточечностью ядра. Ядро считать а) сферой радиуса  $R$ , по поверхности которой равномерно распределен заряд; б) шаром радиуса  $R$  с равномерно распределенным по объему зарядом. Оценить поправку для атома водорода, считая  $R \sim 10^{-13}$  см. Как изменится результат для состояния  $2p$ ?

**18.3.** Оценить величины поправок к кулоновским уровням энергии водорода, обусловленных:

а) релятивистскими поправками к кинетической энергии электрона;

б) взаимодействием с магнитным моментом ядра (сверхтонкая структура);

в) наличием у ядра электрического квадрупольного момента (так называемая квадрупольная сверхтонкая структура).

**18.4.** Задачи 8.9 ГКК и 8.10 ГКК.

а) Плоский ротатор с моментом энергии  $I$  и электрическим дипольным моментом  $d$  помещен в однородное электрическое поле  $\mathcal{E}$ , лежащее в плоскости вращения. Рассматривая действие поля как возмущение, найти поляризуемость основного состояния ротатора.

б) В условиях предыдущей задачи найти в первых двух порядках теории возмущений сдвиг и расщепление энергетических уровней возбужденных состояний ротатора. Указать правильные функции нулевого приближения. Специально обсудить случай первого возбужденного уровня.

в) В каком порядке теории возмущений возникает расщепление  $n$ -ого уровня ротатора? Вычислить это расщепление.

## §19. Уравнение Шредингера для частицы в электромагнитном поле

Классическая функция Гамильтона

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

где обобщенный импульс равен

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

заменяется оператором

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

При этом ток равен

$$\mathbf{j} = \frac{1}{2m} \left[ \Psi^* \left( -i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \Psi + \text{k.c.} \right].$$

**Калибровочная инвариантность:** при замене

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

УШ не изменяется (здесь  $f$  — произвольная функция координат и времени).

## ВОПРОСЫ

**19.1.** Определить уровни энергии и волновые функции для заряженной частицы в постоянном и однородном магнитном поле. Выбрать векторный потенциал в виде  $A = (0, xB, 0)$ .

**19.2.** Считая известным гамильтониан частицы в электромагнитном поле, найти

- а) выражение для оператора скорости  $\hat{v}$ ;
- б) коммутационные соотношения для компонент скорости;
- в) уравнение для

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

(операторный аналог уравнения Ньютона);

г) показать, что в постоянном и однородном магнитном поле  $B$  операторы

$$\hat{x}_0 = x + \frac{1}{\omega} \hat{v}_y; \quad \hat{y}_0 = y - \frac{1}{\omega} \hat{v}_x; \quad \omega = \frac{eB}{mc}$$

соответствуют сохраняющимся величинам, но не могут быть измерены одновременно. (В классической электродинамике эти величины соответствуют координатам центра окружности, по которой движется заряженная частица).

## §20. Постановка задачи рассеяния. Амплитуда рассеяния

Рассматриваем решение стационарного УШ

$$(\Delta + k^2) \psi(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2} U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}), \quad (20.1)$$

которое на больших расстояниях  $r \gg a$  ( $a$  — характерный радиус действия потенциала  $U(\mathbf{r})$ ) имеет вид суперпозиции падающей плоской волны и сферической волны, расходящейся от центра (рис. 11):

$$\psi = \psi_{\text{пад}} + \psi_{\text{рас}} = e^{ikz} + f \frac{e^{ikr}}{r}, \quad \mathbf{k} = (0, 0, k), \quad \mathbf{k}' = k \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (20.2)$$

Здесь функция  $f = f(k, \theta, \varphi)$  — амплитуда рассеяния.

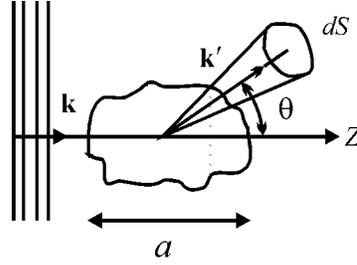


Рис. 11: Схема рассеяния

Дифференциальное сечение рассеяния  $d\sigma$  равно отношению числа частиц, рассеянных в единицу времени в элемент телесного угла  $d\Omega$

$$d\dot{N} = (j_{\text{рас}})_r dS = (j_{\text{рас}})_r r^2 d\Omega, \quad (j_{\text{рас}})_r = -\frac{i\hbar}{2m} \psi_{\text{рас}}^* \frac{\partial \psi_{\text{рас}}}{\partial r} + \text{k.c.} = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f|^2}{r^2},$$

к плотности потока падающих частиц  $(j_{\text{пад}})_z = \hbar k/m$ :

$$d\sigma = \frac{d\dot{N}}{(j_{\text{пад}})_z} = |f|^2 d\Omega.$$

Заметим, что, обсуждая сечение, мы имеем в виду расстояниях  $r$ , большие не только по сравнению с  $a$ , радиусом действия потенциала, но и с дебройлевской длиной волны  $\lambda$ .

От дифференциального УШ (20.1) и граничного условия (20.2) удобно перейти к интегральному уравнению

$$\psi(r) = e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} U(r') \psi(r') d^3r'. \quad (20.3)$$

Такой переход можно обосновать известными из электродинамики результатами (см. Ландау Л. Д., Лифшиц Е.М. Теория поля (М.: Наука, 1988, § 64). Действительно, волновое уравнение

$$\left( \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \varphi(r, t) = -4\pi\rho(r, t)$$

при гармонической зависимости от времени потенциалов и плотностей зарядов

$$\varphi(r, t) = \varphi(r) e^{-i\omega t}, \quad \rho(r, t) = \rho(r) e^{-i\omega t}$$

имеет вид

$$(\Delta + k^2)\varphi(\mathbf{r}) = -4\pi\rho(\mathbf{r}), \quad (20.4)$$

аналогичный (20.1) с заменой

$$\varphi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi(\mathbf{r}), \quad \rho(\mathbf{r}) \rightarrow -\frac{m}{2\pi\hbar^2} U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}).$$

Решение же уравнения (20.4) в форме запаздывающих потенциалов таково:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int \frac{e^{ikR}}{R} \rho(\mathbf{r}') d^3r', \quad R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|,$$

что соответствует суперпозиции сферических волн  $e^{ikR}/R$ , расходящихся из центров  $\mathbf{r}'$ , в которых сосредоточены заряды  $\rho(\mathbf{r}') d^3r'$ .

При  $r \gg a$  соотношение (20.3) приводится к виду (20.2). Действительно, при этом

$$k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = k\sqrt{r^2 - 2r\mathbf{r}' + r'^2} = k\left(r - \frac{\mathbf{r}}{r}\mathbf{r}'\right) = kr - k'\mathbf{r}',$$

так что

$$f = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-ik'\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) U(\mathbf{r}) d^3r. \quad (20.5)$$

## §21. Борновское приближение.

### Формула Резерфорда. Атомный формфактор

#### Борновское приближение

Рассматриваем потенциал как возмущение. Для получения амплитуды рассеяния в первом порядке по потенциалу взаимодействия, подставим в (20.5) невозмущенную волновую функцию

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \psi^{(0)}(\mathbf{r}) = e^{ikz} = e^{ikr}$$

и получим

$$f(\mathbf{q}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) d^3r, \quad \mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}, \quad q = 2k \sin \frac{\theta}{2}.$$

**Критерий применимости:**  $|\psi^{(1)}| \ll |\psi^{(0)}|$ , что дает для сферически симметричного потенциала условие

$$\frac{m}{\hbar^2 k} \left| \int_0^\infty U(r) (1 - e^{2ikr}) dr \right| \ll 1.$$

Оно приводится к

$$|U(a)| \ll \begin{cases} \hbar^2/(ma^2) & \text{при } ka \ll 1, \\ \hbar v/a & \text{при } ka \gg 1. \end{cases}$$

Иными словами, характерная потенциальная энергия  $|U(a)|$  должна быть мала либо (для медленных частиц) по сравнению с характерной энергией  $E_{\text{хар}} \sim \hbar^2/(ma^2)$ , либо (для быстрых частиц) по сравнению с  $E_{\text{хар}} \cdot ka$  (в последнем случае  $|U(a)|$  может быть и не мала по сравнению с  $E_{\text{хар}}$ ).

Критерий применимости борновского приближения для рассеяния медленных частиц  $|U(a)| \ll \hbar^2/(ma^2)$  соответствует тому, что в случае притягивающего потенциала притяжение недостаточно для образования связанного состояния. В случае быстрых частиц условие  $|U(a)| \ll \hbar v/a$  соответствует тому, что неопределенность в энергии, связанная с временем пролета, должна быть много больше потенциала взаимодействия; условие  $ka \gg 1$  обеспечивает здесь применимость квазиклассического рассмотрения.

### Формула Резерфорда

Для поля  $U(r) = -\alpha/r$  критерий применимости борновского приближения  $\alpha/\hbar v \ll 1$ . Борновская амплитуда равна

$$f = \frac{2\alpha m}{\hbar^2 q^2},$$

а сечение рассеяния

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[ \frac{\alpha}{2pv \sin^2(\theta/2)} \right]^2 = \frac{\alpha^2}{16E^2 \sin^4(\theta/2)}$$

совпадает с классическим. Отметим без доказательства, что борновская формула для сечения совпадает с точной (это верно лишь в нерелятивистском приближении). Полное сечение равно бесконечности.

### Атомный формфактор

При упругом рассеянии быстрых электронов на атоме последний можно рассматривать как источник статического потенциала  $\varphi(r)$ , создаваемого средним распределением зарядов в атоме

$$\rho(r) = Ze\delta(r) - en(r).$$

Так как  $\Delta\varphi(\mathbf{r}) = -4\pi\rho(\mathbf{r})$ , то из

$$\Delta(\varphi_q e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}) = -q^2 \varphi_q e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = -4\pi\rho_q e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$$

следует, что  $\varphi_q = 4\pi\rho_q/q^2$ . Таким образом,

$$f(\mathbf{q}) = \frac{2e^2 m}{\hbar^2 q^2} [Z - F(\mathbf{q})].$$

Здесь введен так называемый атомный формфактор:

$$F(\mathbf{q}) = \int e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} n(r) d^3r.$$

При  $qa \gg 1$ , то есть при углах рассеяния  $\theta \gg 1/(ka)$ , формфактор  $|F| \ll Z$  и сечение совпадает с Резерфордским. Это вполне естественно: большие углы рассеяния соответствуют малым прицельным параметрам, при которых налетающая частица рассеивается ядром, практически неэкранированным.

При  $qa \ll 1$  имеем

$$Z - F(\mathbf{q}) \approx \frac{1}{6} q^2 \int r^2 n(r) d^3r = \frac{1}{6} q^2 \langle r^2 \rangle.$$

В этой области дифференциальное сечение

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{9} \left( \frac{\langle r^2 \rangle}{a_B} \right)^2.$$

Таким образом, при рассеянии на атоме полное сечение оказывается (в отличие от Резерфордского) конечным.

### Пример

Атом водорода.  $Z = 1$ ,  $n(r) = |\psi_{100}(r)|^2$ , поэтому

$$F(\mathbf{q}) = \frac{1}{(1+u)^2}, \quad u = \frac{1}{4} q^2 a_B^2 = [ka_B \sin(\theta/2)]^2,$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(1 + \frac{1}{2}u)^2}{(1+u)^4} a_B^2, \quad \sigma = \frac{7\pi}{6} \frac{(e^2/a_B)}{E} a_B^2.$$

Указанному распределению зарядов соответствует потенциальная энергия

$$U(r) = -e\varphi(r) = -\frac{e^2}{r} \left( 1 + \frac{r}{a_B} \right) e^{-2r/a_B}.$$

В классической механике в таком поле  $\sigma = \infty$ , что находится в резком противоречии с квантовым (правильным!) результатом.

## Конечные сечения в квантовой механике

Обсудим подробнее вопрос о том, какие потенциалы приводят в квантовой механике к конечным сечениям. Пусть на больших расстояниях  $U(r) \sim \alpha/r^n$ ,  $n > 0$ . В классической механике при рассеянии в таком поле полное сечение бесконечно, так как любым большим прицельным параметрам  $\rho$  соответствуют хотя и малые, но конечные классические углы отклонения

$$\theta_{\text{класс}} \sim \frac{p_{\perp}}{p_z} \sim \frac{F_{\perp} t}{mv} \sim \frac{\alpha}{\rho^n E}, \quad F_{\perp} \sim \frac{\alpha}{\rho^{n+1}}, \quad t \sim \frac{\rho}{v}.$$

В квантовой механике для частицы с прицельным параметром  $\rho$  (у нее  $\Delta r_{\perp} < \rho$ ) неопределенность поперечного импульса  $\Delta p_{\perp} \gtrsim \hbar/\Delta r_{\perp} > \hbar/\rho$ , поэтому квантовая неопределенность угла отклонения равна

$$\Delta\theta_{\text{кв}} \sim \frac{\Delta p_{\perp}}{p_z} > \frac{\hbar}{\rho mv}.$$

Таким образом, при  $n > 1$   $\Delta\theta_{\text{кв}} > \theta_{\text{класс}}$  и поэтому квантомеханические результаты могут существенно отличаться от классических.

Зная поведение  $U(r)$  на больших расстояниях, где взаимодействие всегда слабое и поэтому борновское приближение применимо, можно оценить поведение амплитуды в области малых углов рассеяния:

$$f(q) \propto \int_{r_0}^{\infty} e^{-iqr} \frac{\alpha}{r^n} d^3r \propto \frac{1}{q^{3-n}} \propto \frac{1}{\theta^{3-n}}.$$

Отсюда получаем, что дифференциальное сечение

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \frac{1}{(\theta^2)^{3-n}}$$

конечно при  $\theta \rightarrow 0$ , если  $n > 3$ , а полное сечение

$$\sigma \propto \int \frac{d\theta^2}{(\theta^2)^{3-n}}$$

конечно при  $n > 2$ .

Опыты по рассеянию быстрых электронов на ядрах. Формфакторы элементарных частиц.

## ВОПРОСЫ

**21.1.** Рассеяние на прямоугольной потенциальной яме в борновском приближении (задача 1 к § 126 КМ). Обсудить условия применимости приближения.

**21.2.** То же для потенциала Юкава  $U(r) = (\alpha/r) e^{-r/a}$ .

**21.3.** То же для кулонового потенциала  $U(r) = \alpha/r$  (предельный случай потенциала Юкава при  $a \rightarrow \infty$ ).

**21.4.** Найти полное сечение рассеяния быстрой частицы на потенциале Юкава  $U(r) = (\alpha/r) e^{-r/a}$  при условии  $\alpha/\hbar v \gg 1$ .

## 22. Фазовая теория рассеяния

Рассеяние на сферически симметричном потенциале является симметричным, то есть  $\psi(r)$  зависит лишь от  $r$  и  $\theta$ , но не от  $\varphi$ . Поэтому разложение этого решения по парциальным волнам содержит лишь  $Y_{l0}(\theta, \varphi) \propto P_l(\cos \theta)$ :

$$\psi(r) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \theta) R_{kl}(r). \quad (22.1)$$

Как известно (см. §15),

$$R_{kl}(r) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sin \left( kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l \right) \quad \text{при } r \rightarrow \infty.$$

Чтобы выполнялось граничное условие (20.2), необходимо

$$A_l = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{k} (2l + 1) i^l e^{i\delta_l}.$$

Тогда

$$f(k, \theta) = \sum_l (2l + 1) f_l(k) P_l(\cos \theta); \quad f_l = \frac{S_l - 1}{2ik}; \quad S_l = e^{2i\delta_l};$$

$$\sigma_{\text{el}} = \int |f|^2 d\Omega = 4\pi \sum_l (2l + 1) |f_l|^2 = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l + 1) |1 - S_l|^2.$$

### Понятие о неупругом сечении

Решение (22.1) при  $r \rightarrow \infty$  можно представить не только в виде (20.2), но и в виде двух сферических волн, расходящейся и сходящейся:

$$\psi(r) \rightarrow \psi_{\text{pc}} + \psi_{\text{cx}} = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l + 1) P_l(\cos \theta) \left[ S_l \frac{e^{ikr}}{r} - (-1)^l \frac{e^{-ikr}}{r} \right] \quad \text{при } r \rightarrow \infty$$

(разумеется, при таком разбиении расходящаяся волна  $\psi_{\text{pc}}$  отличается от  $\psi_{\text{pac}}$  в (20.2)). Парциальная амплитуда расходящейся волны отличается на множитель  $(-1)^{l+1} S_l$  от соответствующей амплитуды в сходящейся волне. Если нет поглощения частиц силовым центром, то этот множитель должен быть по модулю равен единице,  $|S_l| = 1$ . Если есть поглощение, то  $|S_l| < 1$ , а величина  $|S_l|^2$  характеризует уменьшение потока частиц в расходящейся волне по сравнению с потоком частиц в сходящейся. Действительно,

$$\dot{N}_{\text{cx}} = \int (\mathbf{j}_{\text{cx}})_r r^2 d\Omega = -\frac{\pi \hbar}{mk} \sum_l (2l + 1),$$

$$\dot{N} = \int (\mathbf{j}_{\text{pc}})_r r^2 d\Omega = \frac{\pi \hbar}{mk} \sum_l (2l + 1) |S_l|^2.$$

Поэтому неупругое сечение равно

$$\sigma_{\text{in}} = \frac{|\dot{N}_{\text{cx}}| - \dot{N}_{\text{pc}}}{(\mathbf{j}_{\text{пад}})_z} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l + 1) (1 - |S_l|^2).$$

## Оптическая теорема

Для процессов рассеяния и поглощения существуют определенные ограничения и связи. Введем понятие парциального сечения  $\sigma^{(l)}$ , представив  $\sigma = \sum_l \sigma^{(l)}$ . В классической механике ( $l \gg 1$ ) момент импульса  $M = p\rho_l = \hbar k\rho_l = \hbar l$ , поэтому  $\rho_l = l/k = \bar{\lambda}l$  ( $\bar{\lambda} = \lambda/2\pi = 1/k$ ), а под парциальным сечением  $\sigma_{\text{класс}}^{(l)}$  естественно понимать площадь кольца между окружностями радиусов  $\rho_{l+1}$  и  $\rho_l$ , то есть

$$\sigma_{\text{класс}}^{(l)} = \pi(\rho_{l+1}^2 - \rho_l^2) = \pi \bar{\lambda}^2 (2l + 1).$$

Парциальные сечения для упругого, неупругого и полного  $\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{in}}$  сечения можно записать в виде

$$\sigma_{\text{el}}^{(l)} = \sigma_{\text{класс}}^{(l)} |1 - S_l|^2, \quad \sigma_{\text{in}}^{(l)} = \sigma_{\text{класс}}^{(l)} (1 - |S_l|^2), \quad \sigma_{\text{tot}}^{(l)} = \sigma_{\text{класс}}^{(l)} \cdot 2(1 - \text{Re } S_l).$$

При  $S_l = 1$  нет ни поглощения, ни рассеяния; при  $|S_l| = 1$  есть только рассеяние, но нет поглощения. Так как  $|S_l| \leq 1$ , то

$$\sigma_{\text{el}}^{(l)} \leq \sigma_{\text{tot}}^{(l)} \leq 4 \cdot \sigma_{\text{класс}}^{(l)}, \quad \sigma_{\text{in}}^{(l)} \leq \sigma_{\text{класс}}^{(l)}.$$

Если есть поглощение частиц ( $|S_l| < 1$ ), то непременно происходит и рассеяние частиц. Поглощение максимально при  $S_l = 0$  и в этом случае

$$\sigma_{\text{in}}^{(l)} = \sigma_{\text{el}}^{(l)} = \sigma_{\text{класс}}^{(l)}.$$

Еще одно соотношение возникает, если сравнить

$$\sigma_{\text{tot}} = \sigma_{\text{el}} + \sigma_{\text{in}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l + 1) 2 (1 - \text{Re } S_l)$$

с выражением для мнимой частицы амплитуды рассеяния на угол нуль:

$$\text{Im } f(k, \theta = 0) = \sum_l (2l + 1) P_l(1) \text{Im} \frac{S_l - 1}{2ik} = \frac{1}{2k} \sum_l (2l + 1) (1 - \text{Re } S_l).$$

Отсюда получаем оптическую теорему:

$$\text{Im } f(k, \theta = 0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}}.$$

Ее смысл тот же, что и в оптике: ослабление падающего потока происходит за счет интерференции падающей волны и волны, рассеянной под очень малыми углами.

### Упругое рассеяние медленных частиц

При  $ka \ll 1$  прицельные параметры  $\rho_l = l/k \gg a$  для  $l \geq 1$ , поэтому лишь  $s$ -волна может давать заметное рассеяние. Таким образом,

$$f = \frac{e^{2i\delta_0} - 1}{2ik},$$

дифференциальное сечение изотропно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \text{const} = \frac{\sigma}{4\pi},$$

а полное сечение определяется фазой  $s$ -волны

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0.$$

### Дифракционное рассеяние быстрых частиц на черном шаре

Пусть идеально поглощающий (черный) шар имеет радиус  $a$ . Рассмотрим рассеяние быстрых ( $ka \gg 1$ ) частиц на таком шаре (пример: нейтроны с энергией  $E \sim 100$  МэВ рассеиваются на тяжелом ядре радиуса  $a \sim 10^{-12}$  см, при этом  $ka \sim 10$ ). Эта задача вполне аналогична дифракции плоской световой волны на черном шаре. Прицельный параметр  $\rho_{l_0} = a$  соответствует  $l_0 = ka \gg 1$ . При  $l > l_0$

частицы не сталкиваются с шаром,  $S_l = 1$ . При  $l < l_0$  частицы полностью поглощаются,  $S_l = 0$ . Строго говоря, эти утверждения справедливы лишь для  $l \gg l_0$  и  $l \ll l_0$ , но область  $l \approx l_0$  не дает большого вклада в сечение. Таким образом,

$$\sigma_{\text{el}} = \sigma_{\text{in}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{k^2}^{l_0} (2l + 1) = \frac{\pi}{k^2} \int_0^{l_0} 2l dl = \pi a^2, \quad \sigma_{\text{tot}} = 2\pi a^2,$$

то есть полное сечение вдвое больше классического  $\sigma_{\text{класс}} = \pi a^2$ .

Амплитуда упругого рассеяния велика лишь в области малых углов  $\theta \lesssim 1/(ka)$ :

$$f(k, \theta) = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{l_0} (2l + 1) P_l(\cos \theta) = \frac{i}{k} \int_0^{l_0} l J_0(l\theta) dl = \frac{ia}{\theta} J_1(ka\theta).$$

Поэтому

$$\frac{d\sigma_{\text{el}}}{d\Omega} = |f|^2 = \frac{1}{4} a^2 \cdot \begin{cases} (ka)^2 & \text{при } \theta \ll 1/(ka) \\ \frac{8}{\pi ka\theta^3} \sin^2(ka\theta - \frac{\pi}{4}) & \text{при } \theta \gg 1/(ka). \end{cases}$$

## Упругое рассеяние быстрых частиц на идеально отражающем шаре

Пусть радиус шара  $a$  и  $ka \gg 1$ . Полное сечение определяет число частиц, выбывших из начального пучка. В классике это сечение  $\pi a^2$  связано лишь с прямым столкновением с мишенью. С учетом волновых свойств частиц их выбывание из пучка, то есть изменение начального импульса, связано также с дифракцией.

Как и в предыдущем случае  $S_l = 1$  при  $l > l_0$ . При  $l < l_0$  решение УШ для радиальной волновой функции имеет вид  $R_{kl}(r) = 0$  при  $r < a$  и

$$R_{kl}(r) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{r} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right) \quad \text{при } r > a.$$

Сшивка при  $r = a$  дает  $\delta_l \approx -(ka - \frac{1}{2}\pi l)$ . Для нахождения полного сечения используем оптическую теорему

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_0} (2l + 1)(1 - \cos 2\delta_l).$$

Слагаемые, содержащие  $\cos 2\delta_l \approx (-1)^l \cos(2ka)$ , быстро осциллируют при изменении  $l$ , и поэтому их вкладом в сумму можно пренебречь. В итоге получаем  $\sigma = 2\pi a^2$ , что вдвое превышает классическое сечение  $\sigma_{\text{класс}} = \pi a^2$ .

В данном случае отличие от классического результата связано с наличием помимо квазиклассического рассеяния, обусловленного углами  $\theta \gg 1/(ka)$ , дифракционного рассеяния на малые углы  $\theta \lesssim 1/(ka)$ . Чтобы увидеть это, представим амплитуду рассеяния

$$f = \frac{i}{2k} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) (1 - e^{2i\delta_l}) P_l(\cos \theta)$$

в виде двух слагаемых  $f = f_{\text{диф}} + f_{\text{класс}}$ , где  $f_{\text{диф}}$  совпадает с амплитудой рассеяния в предыдущем случае, а

$$f_{\text{класс}} = \frac{-i}{2k} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) e^{2i\delta_l} P_l(\cos \theta) \approx \frac{-i}{2} a e^{-2ika \sin(\theta/2)}.$$

Доказательство того факта, что  $|f_{\text{класс}}|^2 \approx a^2/4$  при  $\theta \gg 1/(ka)$  (в полном соответствии с классическим изотропным рассеянием  $d\sigma_{\text{класс}}/d\Omega = a^2/4$ ) можно найти в задаче 13.32 ГКК.

Таким образом, вклады  $f_{\text{диф}}$  и  $f_{\text{класс}}$  в полное сечение одинаковы, а вклад их интерференции пренебрежимо мал.

Для классических частиц дифракция практически ненаблюдаема. Так, для частицы с  $m \sim 1$  г,  $v \sim 1$  см/с углы дифракции на шаре радиуса  $a \sim 1$  см настолько малы,  $\theta_{\text{диф}} \sim \hbar/(mva) \sim 10^{-27}$ , что увидеть это рассеяние можно было бы лишь на расстояниях  $\sim a/\theta_{\text{диф}} \sim 10^{27}$  см.

## Резонансное рассеяние

Перепишем асимптотическое выражение (при  $r \rightarrow \infty$ )

$$R_{kl}(r) \propto \frac{1}{r} \sin\left(kr - \frac{\pi l}{2} + \delta_l\right)$$

в виде

$$R_{kl}(r) \rightarrow \frac{\text{const}}{r} [a_l(E) e^{ikr} + a_l^*(E) e^{-ikr}], \quad a_l(E) = \frac{1}{i} e^{i(\delta_l - \frac{1}{2}\pi l)}.$$

Если в данном поле  $U(r)$  возможно квазистационарное состояние при  $E = E_r - \frac{i}{2}\Gamma$ , то асимптотика  $R_{kl}(r)$  при данной энергии должна содержать только расходящуюся волну, то есть

$$a_l^*\left(E_r - \frac{i}{2}\Gamma\right) = 0.$$

Отсюда следует, что парциальная амплитуда рассеяния

$$f_l(E) = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1) = \frac{1}{2ik} \left[ \frac{a_l(E)}{a_l^*(E)} (-1)^{l+1} - 1 \right]$$

должна иметь полюс при  $E = E_r - \frac{i}{2}\Gamma$ . Пусть вблизи резонанса

$$a_l^*(E) \approx \beta_l \cdot (E - E_r + \frac{i}{2}\Gamma),$$

тогда

$$f_l(E) \approx \frac{1}{2ik} \left[ (-1)^{l+1} \frac{\beta_l^*}{\beta_l} \frac{E - E_r - \frac{i}{2}\Gamma}{E - E_r + \frac{i}{2}\Gamma} - 1 \right] \approx f_l^{(0)} - \frac{1}{2k} \frac{\Gamma}{E - E_r + \frac{i}{2}\Gamma} e^{2i\delta_l^{(0)}},$$

где  $\delta_l^{(0)}$  и  $f_l^{(0)}$  — фаза и амплитуда рассеяния вдали от резонанса, причем

$$\delta_l \approx \delta_l^{(0)} - \arctg \frac{\Gamma}{2(E - E_r)}.$$

При прохождении через резонанс фаза рассеяния изменяется на  $\pi$ . Парциальное сечение имеет резонансную зависимость от энергии:

$$\sigma^{(l)} = 4\pi(2l+1) |f_l|^2 \rightarrow \frac{\pi}{k^2} (2l+1) \frac{\Gamma^2}{(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2}$$

и при  $E = E_r$  достигает максимально возможного значения

$$\frac{4\pi}{k^2} (2l+1).$$

При  $E = E_r - \frac{i}{2}\Gamma$  радиальная волновая функция на больших расстояниях равна

$$R_l(r) = -i\Gamma \beta_l^* \frac{e^{ikr}}{r}.$$

Если  $R_l(r)$  нормирована во внутренней области на единицу, то полный поток в расходящейся волне  $v\Gamma^2|\beta_l|^2$  должен равняться вероятности распада в единицу времени  $\Gamma/\hbar$ . Отсюда

$$|\beta_l|^2 = \frac{1}{\hbar v \Gamma}.$$

Аналогичным образом можно показать, что при аналитическом продолжении по  $k$  функций  $R_{kl}(r)$  и  $f_l(k)$  в область отрицательных значений  $E$  (при этом  $k \rightarrow i\kappa$ ), связанным состоянием с энергией  $E_n < 0$  соответствуют полюса амплитуды рассеяния при  $E = E_n$ .

## ВОПРОСЫ

**22.1.** Вычислить сечение рассеяния медленных частиц в поле  $U(r) = -G\delta(r - a)$  в условиях резонанса в  $s$ -волне (задача 13.34 ГКК).

**22.2.** Найти сечение рассеяния медленных частиц в случае:

а) сферической прямоугольной потенциальной ямы (включая и резонансное рассеяние — см. задачу 13.35 ГКК);

б) сферического прямоугольного потенциального барьера.

**22.3.** Найти фазовые сдвиги  $\delta_l(k)$  в поле  $U(r) = \alpha/r^2$ ,  $\alpha > 0$ . Выполнить суммирование ряда, представляющего разложение амплитуды по парциальным волнам, в случае  $m\alpha/\hbar^2 \ll 1$  при произвольных углах рассеяния. Найти  $d\sigma/d\Omega$  и  $\sigma$  (задача 13.29а ГКК). Сравнить с классическим рассеянием на малые углы.

**22.4.** Как ведет себя сечение неупругого рассеяния в пределе малых скоростей?

## §23. Гайзенберговское представление

В обычном (шредингеровском) представлении операторы  $\mathbf{r}$  и  $\hat{p} = -i\hbar\nabla$  не зависят от  $t$ , а оператор физической величины  $\hat{A}(\mathbf{r}, \hat{p}, t)$  может зависеть от  $t$  лишь частным образом. Зависимость среднего значения этой величины от времени

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

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

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

Представим волновую функцию в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\mathbf{r}) = \hat{U}(t) \Psi(\mathbf{r}, 0); \quad \hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

или

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

Тогда среднее значение  $\langle A(t) \rangle$  можно записать так:

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

где

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^{-1}(t) \hat{A} \hat{U}(t)$$

— это оператор в гайзенберговском представлении. Таким образом, зависимость от времени в гайзенберговском представлении перенесена с волновых функций на операторы. При этом

$$\hat{H}_H = \hat{U}^{-1} \hat{H} \hat{U} = \hat{H}.$$

Легко получить выражение для производной по времени от оператора в гайзенберговском представлении:

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

## ВОПРОСЫ

**23.1.** Задачи 7.29-7.31 ГКК. Найти операторы координаты и импульса в гайзенберговском представлении для линейного гармонического осциллятора.

Задачу предлагается решить двумя способами:

а) используя унитарное преобразование, связывающее операторы физических величин в гайзенберговском и шредингеровском представлениях;

б) непосредственным решением уравнений движения для гайзенберговских операторов.

**23.2.** Задачи 7.34 ГКК. Найти значение “разновременного” коммутатора импульса и координаты  $[\hat{p}(t), \hat{x}(t')]$  для: а) свободной частицы; б) частицы в однородном поле; в) линейного осциллятора.

**23.3.** Задача 7.36 ГКК. Используя вид гайзенберговских операторов  $\hat{p}(t), \hat{x}(t)$ , найти зависимость от времени следующих средних:

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

для линейного осциллятора в состоянии, описываемом волновой функцией вида

$$\psi(x) = A \exp \left[ \frac{ip_0 x}{\hbar} - \frac{(x - x_0)^2}{2a^2} \right].$$

## §24. Опыт Штерна–Герлаха. Спин

В классической теории магнитный момент атома

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{1}{2c} \sum_a e_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a$$

обусловлен в основном движением электронов

$$\boldsymbol{\mu} \approx -\frac{|e|\hbar}{2m_e c} \mathbf{M},$$

где  $\mathbf{M} = \sum_e \mathbf{r}_e \times \mathbf{p}_e$  – орбитальный момент импульса электронов. Взаимодействие нейтрального атома со внешним магнитным полем  $\mathbf{B}$  описывается добавкой

$$V = -\boldsymbol{\mu} \mathbf{B}$$

к функции Гамильтона. Во внешнем неоднородном магнитном поле на такой атом действует сила

$$\mathbf{F} = -\nabla V = (\boldsymbol{\mu} \nabla) \mathbf{B}.$$

В опытах Штерна и Герлаха (1921 г.) нейтральный атом пролетал через поперечное неоднородное магнитное поле. В классической электродинамике средняя действующая на атом сила  $F_z = \mu_z \partial B_z / \partial z$  может принимать любые значения из интервала  $-\mu |\partial B_z / \partial z| \leq F_z \leq +\mu |\partial B_z / \partial z|$ , что приводило бы лишь к размытию на пластинке линии, вдоль которой осаждались пролетевшие атомы.

В квантовой механике  $\hat{\mathbf{M}} = \hbar \hat{\mathbf{L}}$  и потому оператор

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_L = -\mu_B \hat{\mathbf{L}}, \quad \text{где } \mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e c}$$

— магнетон Бора.

Величина  $\hat{\mu}_z = -\mu_B \hat{L}_z$  принимает дискретный ряд значений

$$-\mu_B l, \mu_B(l-1), \dots, +\mu_B l,$$

что должно привести к появлению на пластинке  $2l + 1$  полос. Опыт частично подтвердил это предсказание, но для водорода и серебра на пластинке оказалось две полосы, что формально соответствует равенству  $2l + 1 = 2$ , то есть  $l = 1/2$ .

Гипотеза Уленбека и Гаудсмита (1925 г.): электрон имеет собственный (не связанный с вращением вокруг ядра) момент импульса или *спин*  $\hbar\hat{s}$ , причем  $\hat{s}_z$  имеет собственные значения  $\pm 1/2$ . Следует отметить, что механическая модель электрона: шарик радиуса  $r_e = e^2/(m_e c^2)$  вращается вокруг своей оси, несостоятельна, так как моменту импульса  $\hbar/2 \sim m_e r_e v$  соответствует скорость вращения  $v \sim \hbar/(m_e r_e) \sim \hbar c^2/e^2 \sim 137 c$ !

Коммутационные соотношения (14.2) для компонент орбитального момента определяются лишь общими свойствами операции поворота, поэтому полученные в § 14 общие формулы справедливы и для спина.

В частности,

$$[\hat{s}_m, \hat{s}_n] = i\varepsilon_{mnk}\hat{s}_k,$$

откуда следует, что  $[\hat{s}_z, \hat{s}^2] = 0$  и поэтому существуют совместные собственные функции  $\hat{s}^2$  и  $\hat{s}_z$ :

$$\hat{s}^2 |s, m\rangle = s(s+1) |s, m\rangle = \frac{3}{4} |s, m\rangle; \quad \hat{s}_z |s, m\rangle = m |s, m\rangle; \quad m = \pm s = \pm \frac{1}{2}.$$

Введем краткие обозначения  $|s = \frac{1}{2}, m = \frac{1}{2}\rangle = |+\rangle$ ,  $|s = \frac{1}{2}, m = -\frac{1}{2}\rangle = |-\rangle$ . Любое спиновое состояние  $| \rangle$  можно представить в виде

$$| \rangle = a_1 |+\rangle + a_2 |-\rangle, \quad (24.1)$$

причем  $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$ .

Из  $\hat{s}_z |+\rangle = \frac{1}{2} |+\rangle$  следует

$$\langle + | \hat{s}_z |+\rangle = \frac{1}{2}, \quad \langle - | \hat{s}_z |+\rangle = 0;$$

аналогично,

$$\langle + | \hat{s}_z |-\rangle = 0, \quad \langle - | \hat{s}_z |-\rangle = -\frac{1}{2}.$$

Набор матричных элементов  $\langle s, m' | \hat{s}_z |s, m\rangle$  удобно представить в виде матрицы

$$\begin{pmatrix} \langle + | \hat{s}_z |+\rangle, & \langle + | \hat{s}_z |-\rangle \\ \langle - | \hat{s}_z |+\rangle, & \langle - | \hat{s}_z |-\rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Для операторов  $\hat{l}_{\pm} = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$  мы выводили соотношение

$$\hat{l}_{\pm} |l, m\rangle = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)} |l, m \pm 1\rangle.$$

Подобным же образом получим  $\hat{s}_+ |+\rangle = 0, \hat{s}_+ |-\rangle = |+\rangle$ , то есть

$$\hat{s}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_- = (\hat{s}_+)^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{s}_x = \frac{\hat{s}_+ + \hat{s}_-}{2} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{\hat{s}_+ - \hat{s}_-}{2i} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Действие любого оператора  $\hat{s}_m$  на произвольное состояние (24.1) может быть описано, как действие соответствующей этому оператору матрицы на спинор

$$\chi = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}.$$

## §25. Матрицы Паули. Уравнение Паули

Определим матрицы Паули  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  соотношением  $\hat{s} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}$ , тогда

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

Их свойства:

$$\sigma_m \sigma_n = I \delta_{mn} + i \varepsilon_{mnk} \sigma_k, \quad \text{Sp } \sigma_m = 0, \quad \text{Sp } I = 2.$$

Любую квадратную  $2 \times 2$  матрицу  $A$  можно представить в виде

$$A = a_0 I + \mathbf{a} \boldsymbol{\sigma}, \quad a_0 = \frac{1}{2} \text{Sp } A, \quad \mathbf{a} = \frac{1}{2} \text{Sp } (A \boldsymbol{\sigma}).$$

Магнитный момент заряженной частицы, обусловленный ее орбитальным движением,  $\hat{\boldsymbol{\mu}}_l$  связан с ее орбитальным моментом  $\hat{l}$  соотношением

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_l = \frac{e\hbar}{2mc} \hat{l}.$$

Связь же собственного момента частицы  $\hat{\boldsymbol{\mu}}_s$  с ее спином  $\hat{s}$ , как показывает опыт, зависит от вида частицы

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_e = -1,001\,159\,625 \mu_B 2\hat{s} \approx -\mu_B 2\hat{s}, \quad \mu_B = \frac{|e|\hbar}{2m_e c},$$

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_p = 2,79 \mu_N 2\hat{s}, \quad \hat{\boldsymbol{\mu}}_n = -1,91 \mu_N 2\hat{s}, \quad \mu_N = \frac{|e|\hbar}{2m_p c}.$$

С учетом магнитного момента уравнение для движения частицы в электромагнитном поле принимает вид (Паули, 1927 г.)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi; \quad \hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\varphi - \hat{\boldsymbol{\mu}}_s \mathbf{B}, \quad (25.1)$$

в котором волновая функция — двухкомпонентный спинор

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \Psi_2(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix},$$

а условие нормировки таково:

$$\int (|\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2) d^3r = 1.$$

Уравнение движения спина электрона в магнитном поле

$$\frac{d\hat{s}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{s}] = \frac{1}{\hbar} \hat{\boldsymbol{\mu}}_e \times \mathbf{B} \approx -\frac{2\mu_B}{\hbar} \hat{s} \times \mathbf{B}.$$

В случае квазиклассичности движения электрона, усредняя это уравнение по квазиклассическому волновому пакету, получим для средних значений

$$\frac{ds}{dt} \approx \frac{e}{mc} \mathbf{s} \times \mathbf{B}.$$

Аналогичное уравнение для скорости электрона имеет хорошо известный вид

$$\frac{dv}{dt} = \frac{e}{mc} \mathbf{v} \times \mathbf{B}.$$

Таким образом, в магнитном поле  $\mathbf{B}$  как вектор скорости, так и вектор спина электрона процессируют вокруг направления магнитного поля  $\mathbf{B}$  с одной и той же (циклотронной) частотой

$$\boldsymbol{\omega}_e = -\frac{e\mathbf{B}}{mc}.$$

Поэтому проекция спина на направление  $\mathbf{v}$  остается неизменной (учет малого отличия  $\hat{\boldsymbol{\mu}}_e$  от  $-2\mu_B \hat{s}$  приводит к небольшому рассогласованию этих скоростей).

Покажите, что имеет место соотношение

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + e\varphi - \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B} = \frac{1}{2m} \left( \boldsymbol{\sigma} \left( \hat{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right)^2 + e\varphi. \quad (25.2)$$

(Оно окажется полезным в дальнейшем.)

## §26. Сложение моментов

Рассмотрим две подсистемы с заданными моментами  $j_1$  и  $j_2$ . Суммарный момент  $\hat{j} = \hat{j}_1 + \hat{j}_2$ , величина его  $j$  может принимать различные значения. Примеры: система протон и нейтрон в  $s$ -состоянии (при этом  $j_1 = s_1 = 1/2$ ,  $j_2 = s_2 = 1/2$ ,  $\hat{j} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2$  — полный спин системы); орбитальный и спиновый момент электрона в атоме ( $j_1 = l$ ,  $j_2 = s = 1/2$ ,  $\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$ ) и т.д. Состояние подобной системы можно описать двумя различными способами:

1) Набором собственных функций коммутирующих операторов  $\hat{j}_1^2$ ;  $\hat{j}_{1z}$ ;  $\hat{j}_2^2$ ;  $\hat{j}_{2z}$  с собственными значениями  $j_1(j_1 + 1)$ ;  $m_1$ ;  $j_2(j_2 + 1)$ ;  $m_2$ :

$$\Psi_{m_1 m_2} = |j_1 m_1\rangle \cdot |j_2 m_2\rangle;$$

имеется всего  $N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$  таких функций.

2) Набором собственных функций коммутирующих операторов  $\hat{j}^2$ ;  $\hat{j}_z$ ;  $\hat{j}_1^2$ ;  $\hat{j}_2^2$  с собственными значениями  $j(j + 1)$ ;  $m$ ;  $j_1(j_1 + 1)$ ;  $j_2(j_2 + 1)$ :

$$\Phi_{jm} = |jm j_1 j_2\rangle.$$

При каждом  $j$  имеется  $2j + 1$  различных значений  $m = -j, -j + 1, \dots, j$ , поэтому число таких функций (равное, конечно,  $N$ ) есть  $N = \sum_j (2j + 1)$ , где сумма берется по всем допустимым при данных  $j_1$  и  $j_2$  значениях  $j$ .

Функции  $\Psi_{m_1 m_2}$  и  $\Phi_{jm}$  должны быть снабжены также индексами  $j_1$  и  $j_2$ , но так как эти значения фиксированы, мы их для упрощения формул не выписываем явно.

Под проблемой сложения моментов понимаются следующие задачи:

- а) какие значения  $m$  возможны при заданных  $m_1$  и  $m_2$ ?
- б) какие значения  $j$  возможны при данных  $j_1$  и  $j_2$ ?
- в) ясно, что любая функция  $\Phi_{jm}$  может быть выражена через линейные комбинации функций  $\Psi_{m_1 m_2}$ , и наоборот:

$$\Phi_{jm} = \sum_{m_1 m_2} C_{m_1 m_2}^{jm} \Psi_{m_1 m_2}; \quad \Psi_{m_1 m_2} = \sum_{jm} \tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm} \Phi_{jm}.$$

Как найти коэффициенты  $C$  и  $\tilde{C}$  (их называют коэффициентами Клебша–Гордана)?

Сформулируем ответы на эти вопросы:

а) Так как  $\hat{j}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}$ , то

$$m = m_1 + m_2.$$

б) Величина  $j$  принимает  $2j_1 + 1$  (при  $j_2 > j_1$ ) или  $2j_2 + 1$  (при  $j_2 < j_1$ ) значений

$$j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2,$$

причем интервал значений  $j$  между наименьшим  $j_{\min} = |j_1 - j_2|$  и наибольшим  $j_{\max} = j_1 + j_2$  значениями таков, как если бы отрезки длиной  $j_1$ ,  $j_2$  и  $j$  составляли треугольник.

в) Поскольку

$$C_{m_1 m_2}^{jm} = \langle \Phi_{jm} | \Psi_{m_1 m_2} \rangle, \quad \tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm} = \langle \Psi_{m_1 m_2} | \Phi_{jm} \rangle,$$

то

$$\tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm} = (C_{m_1 m_2}^{jm})^*.$$

Если выбрать коэффициенты  $C_{m_1 m_2}^{jm}$  вещественными, то

$$\tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm} = C_{m_1 m_2}^{jm}.$$

Конструктивный способ нахождения коэффициентов Клебша–Гордана и доказательство ответа на вопрос б) мы укажем на двух простых примерах.

### Примеры

$$1. \quad j_1 = s_1 = 1/2, \quad j_2 = s_2 = 1/2, \quad \hat{j} \equiv \hat{S} = \hat{j}_1 + \hat{j}_2.$$

Имеется четыре функции:

$$\Psi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = | \uparrow \uparrow \rangle, \quad \Psi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = | \uparrow \downarrow \rangle, \quad \Psi_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = | \downarrow \uparrow \rangle, \quad \Psi_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = | \downarrow \downarrow \rangle.$$

Так как  $\max S = \max m = \max (m_1 + m_2) = 1$ , то в нашей системе должен существовать триплет  $S = 1, m = 1, 0, -1$ , причем

$$\Phi_{11} = \Psi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = | \uparrow \uparrow \rangle.$$

Две остальные функции  $\Phi_{10}$  и  $\Phi_{1-1}$  могут быть получены действием понижающего оператора  $\hat{S}_- = \hat{s}_{1-} + \hat{s}_{2-}$  на функцию  $\Phi_{11}$ , что дает

$$\Phi_{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \Psi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} + \Psi_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \right) = \frac{| \uparrow \downarrow \rangle + | \downarrow \uparrow \rangle}{\sqrt{2}}, \quad \Phi_{1-1} = \Psi_{-\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = | \downarrow \downarrow \rangle.$$

Оставшаяся ортогональная к  $\Phi_{1m}$  комбинация  $\Psi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} - \Psi_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$  имеет  $S = \max(m) = 0$ . Это синглет

$$\Phi_{00} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \Psi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} - \Psi_{-\frac{1}{2}\frac{1}{2}} \right) = \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Еще проще:  $|\uparrow\uparrow\rangle$  и  $|\downarrow\downarrow\rangle$  соответствуют  $S = 1$ ,  $m = \pm 1$  и симметричны по спинам. Симметрия функции не зависит от проекции момента. Поэтому симметричная (нормированная) функция с  $m = 0$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

имеет  $S = 1$ , а ортогональная к ней антисимметричная функция

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

с  $m = 0$  имеет  $S = 0$ .

**2.**  $j_1 = l, j_2 = s = \frac{1}{2}, \hat{j} = \hat{l} + \hat{s}.$

Имеется  $(2l + 1) \cdot 2$  функций  $\Psi_{m_1 m_2} = Y_{l m_1} \chi_{\frac{1}{2} m_2}$ :

$$\underbrace{Y_{ll}\chi_+}_{m=l+\frac{1}{2}}, \underbrace{Y_{l,l-1}\chi_+, Y_{ll}\chi_-}_{m=l-\frac{1}{2}}, \dots, \underbrace{Y_{l,-l+1}\chi_-, Y_{l,-l}\chi_+}_{m=-l+\frac{1}{2}}, \underbrace{Y_{l,-l}\chi_-}_{m=-l-\frac{1}{2}},$$

где

$$\chi_+ = \chi_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \chi_- = \chi_{\frac{1}{2}-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Так как  $j_{\max} = \max(m_1 + m_2) = l + 1/2$ , то существует мультиплет из  $2j_{\max} + 1 = 2l + 2$  функций  $\Phi_{l+\frac{1}{2}, m}$ , причем

$$\Phi_{l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}} = Y_{ll} \chi_+ = \begin{pmatrix} Y_{ll} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Остальные функции этого мультиплета могут быть получены действием оператора  $\hat{j}_- = \hat{l}_- + \hat{s}_-$ . В частности,

$$\hat{j}_- \Phi_{l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}} = \sqrt{2l} Y_{l,l-1} \chi_+ + Y_{ll} \chi_- = \sqrt{2l+1} \Phi_{l+\frac{1}{2}, l-\frac{1}{2}}.$$

Из двух функций  $\Psi_{m_1 m_2}$  с  $m = l - 1/2$ , помимо указанной выше комбинации, можно построить еще одну, ортогональную к  $\Phi_{l+\frac{1}{2}, l+\frac{1}{2}}$ :

$$Y_{l,l-1} \chi_+ - \sqrt{2l} Y_{ll} \chi_-.$$

Ясно, что эта комбинация принадлежит к мультиплету с  $j = \max(m_1 + m_2) = l - \frac{1}{2}$ , содержащему  $2j + 1 = 2l$  функцией  $\Phi_{l-\frac{1}{2}, m}$ . Таким образом, эти два мультиплета дают набор из  $2l + 2 + 2l = (2l + 1) \cdot 2$  функций  $\Phi_{jm}$  с  $j = l + 1/2$  и  $j = l - 1/2$ .

Покажите, что

$$\Phi_{l+\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+m+1} & Y_{lm} \\ \sqrt{l-m} & Y_{lm+1} \end{pmatrix},$$

$$\Phi_{l-\frac{1}{2}, m+\frac{1}{2}} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l-m} & Y_{lm} \\ -\sqrt{l+m+1} & Y_{lm+1} \end{pmatrix}.$$

Указание: первая из этих функций пропорциональна  $\hat{\Pi} Y_{lm} \chi_+$ , а вторая  $(1 - \hat{\Pi}) Y_{lm} \chi_+$ , где

$$\hat{\Pi} = \frac{1}{2l+1} \left[ (\hat{l} + \hat{s})^2 - \left(l - \frac{1}{2}\right) \left(l - \frac{1}{2} + 1\right) \right] =$$

$$= \frac{1}{2l+1} (\hat{s}_- \hat{l}_+ + \hat{s}_+ \hat{l}_- + 2\hat{s}_z \hat{l}_z + l + 1)$$

— проекционный оператор для мультиплета с  $j = l + 1/2$ .

## §27. Правила отбора для матричных элементов скалярных и векторных операторов

Для каждого **скалярного** оператора  $\hat{S}$ , построенного из операторов  $r^2$ ,  $\hat{p}^2$ ,  $gr$ ,  $\hat{l}^2$ ,  $\hat{l}\hat{s}$  и т.д., справедливо

$$[\hat{J}, \hat{S}] = 0$$

или

$$[\hat{J}_z, \hat{S}] = 0, \quad [\hat{J}^2, \hat{S}] = 0,$$

где  $\hat{J}$  — оператор полного момента импульса системы. Пусть  $|JM\alpha\rangle$  — собственная функция операторов  $\hat{J}^2$  и  $\hat{J}_z$  с собственными значениями  $J(J+1)$  и  $M$  соответственно, набор квантовых чисел  $\alpha$  характеризует другие возможные физические величины, имеющие определенные значения в этом состоянии. Из соотношения

$$\langle J'M'\alpha' | \hat{J}_z \hat{S} - \hat{S} \hat{J}_z | JM\alpha \rangle = (M' - M) \langle J'M'\alpha' | \hat{S} | JM\alpha \rangle = 0$$

следует, что матричный элемент  $\langle J'M'\alpha' | \hat{S} | JM\alpha \rangle$  может быть отличен от нуля лишь при  $M' = M$ . Аналогично, из соотношения

$$\langle J'M'\alpha' | [\hat{J}^2, \hat{S}] | JM\alpha \rangle = 0$$

следует, что этот же 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  $M$  (при  $M' = M$ ), то есть

$$\langle J'M'\alpha' | \hat{S} | JM\alpha \rangle = a(J, \alpha, \alpha') \delta_{JJ'} \delta_{MM'}.$$

В качестве простого примера **векторного** оператора рассмотрим единичный вектор  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ . Известны соотношения между компонентами вектора  $\mathbf{n}$  и сферическими функциями  $Y_{1m}(\theta, \varphi)$ :

$$n_z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}, \quad n_{\pm} = n_x \pm i n_y = \mp \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_{1\pm 1}.$$

Отсюда ясно, что произведение  $n_z | JM\alpha \rangle$  может быть представлено в виде суперпозиции функций  $\Phi_{jm}$  с  $m = M$  и  $j = J - 1, J, J + 1$  при  $J \geq 1$  и  $j = 1/2, 3/2$  при  $J = 1/2$ . Поэтому матричный элемент  $\langle J'M'\alpha' | n_z | JM\alpha \rangle$  может быть отличен от нуля при  $M' = M$  и  $J' = J, J \pm 1$  при  $J \geq 1$  и  $J' = 1/2, 3/2$  при  $J = 1/2$ . Аналогично, для  $\langle J'M'\alpha' | n_{\pm} | JM\alpha \rangle$  получим правила отбора  $M' = M \pm 1$  и те же правила отбора для  $J$ . Существенным для доказательства этих правил отбора был не конкретный вид оператора  $\mathbf{n}$ , а его векторный характер. Поэтому и для любого **векторного** оператора  $\hat{V}$  справедливы правила отбора: матричный элемент

$$\langle J'M'\alpha' | \hat{V}_z | JM\alpha \rangle$$

отличен от нуля лишь при  $M' = M$ , матричный элемент

$$\langle J'M'\alpha' | \hat{V}_+ | JM\alpha \rangle$$

отличен от нуля лишь при  $M' = M + 1$ , а матричный элемент

$$\langle J'M'\alpha' | \hat{V}_- | JM\alpha \rangle$$

отличен от нуля лишь при  $M' = M - 1$ , и во всех этих случаях  $J' = J - 1, J, J + 1$  при  $J \geq 1$  или  $J' = 1/2, 3/2$  при  $J = 1/2$ .

Найдите правила отбора по  $M$  для векторного оператора  $\hat{V}$ , используя соотношение

$$[\hat{J}_z, \hat{V}_\pm] = \pm \hat{V}_\pm,$$

следующее из  $[\hat{J}_m, \hat{V}_n] = i\varepsilon_{mnl} \hat{V}_l$ .

**Дополнительные правила отбора.** Четность состояния  $\hat{V} Y_{lm}$  равна  $\mp(-1)^l$ , если  $\hat{V}$  — полярный (аксиальный) вектор, поэтому  $\langle l'm' | \hat{V} | lm \rangle$  отличен от нуля лишь при  $l' = l \pm 1$  для полярного вектора (например, для  $V = r$ ) и лишь при  $l' = l$  для аксиального вектора (например, для  $\hat{V} = \hat{l} = r \times \hat{p}/\hbar$ ).

## §28. Усреднение векторного оператора

Используя правила коммутации  $[\hat{J}_m, \hat{V}_n] = i\varepsilon_{mnl} \hat{V}_l$ , покажите, что

$$\hat{J}^2 (\hat{J}^2 \hat{V} - \hat{V} \hat{J}^2) - (\hat{J}^2 \hat{V} - \hat{V} \hat{J}^2) \hat{J}^2 = [\hat{J}^2, [\hat{J}^2, \hat{V}]] = 2 (\hat{J}^2 \hat{V} + \hat{V} \hat{J}^2) - 4\hat{J} (\hat{J}\hat{V}).$$

Взяв от этого соотношения матричный элемент по состояниям  $|JM'\alpha\rangle$  и  $|JM\alpha\rangle$ , отличающимся лишь значениями проекции  $\hat{J}_z$ , получим формулу усреднения

$$\langle JM'\alpha | \hat{V} | JM\alpha \rangle = \frac{1}{J(J+1)} \langle JM'\alpha | \hat{J} | JM\alpha \rangle \cdot \langle JM\alpha | \hat{J}\hat{V} | JM\alpha \rangle,$$

то есть усредненный вектор  $V$  направлен по усредненному вектору  $J$ . В частности, при  $M' = M$  получаем

$$\langle JM\alpha | \hat{V} | JM\alpha \rangle = C \cdot (0, 0, M), \quad C = \frac{1}{J(J+1)} \langle JM\alpha | \hat{J}\hat{V} | JM\alpha \rangle.$$

## ВОПРОСЫ

**28.1.** Найти  $(\sigma a)(\sigma b)$ ;  $(\sigma a)^n$ ;  $e^{i\sigma a}$ ;  $e^{\sigma a}$ ;  $U\sigma_m U^{-1}$ , где  $U = e^{i\sigma_z \varphi/2}$ .

**28.2.** Задача 5.4 ГКК. Могут ли квадраты проекций электронного спина на оси  $x, y, z$  иметь одновременно определенные значения?

**28.3.** Задача 5.12 ГКК. Показать, что для состояния, описываемого спиновой волновой функцией

$$\chi = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ \sin \alpha e^{i\beta} \end{pmatrix}$$

(это наиболее общий вид нормированной волновой функции спинового состояния частицы со спином  $s = 1/2$  при  $0 \leq \alpha \leq \pi/2$ ,  $0 \leq \beta < 2\pi$ ), можно указать такую ось в пространстве, проекция спина на которую имеет определенное значение  $+1/2$ . Найти полярный и азимутальный углы этой оси.

**28.4.** Найти

$$\int \psi^* \hat{I} \psi d\Omega, \quad \text{где } \psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{11} + Y_{1-1}),$$

и сравнить полученный результат с результатом предыдущей задачи.

**28.5.** Найти  $\chi$ , для которой  $\hat{s}_x \chi = \frac{1}{2} \chi$ . То же для  $\hat{s}_y \chi = \frac{1}{2} \chi$ .

**28.6.** Задача 5.15 ГКК. Для частицы со спином  $s = 1/2$  указать закон преобразования спиновой волновой функции

$$\chi = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

при вращении системы координат на угол  $\varphi$  относительно оси, направление которой определяется единичным вектором  $\mathbf{n}$ .

Показать, что величина  $\chi_1^* \chi_2 \equiv a_1^* a_2 + b_1^* b_2$  не меняется при указанном преобразовании, то есть является скаляром.

**28.7.** Показать, что угловая волновая функция состояния  $p_{1/2}$  ( $l = 1$ ,  $s = 1/2$ ,  $j = 1/2$ ) может быть представлена в виде  $(-\boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}) \chi$ , где  $\mathbf{n}$  — орт радиус-вектора,  $\chi$  — обычный двухкомпонентный спинор.

**28.8.** Найти относительные интенсивности расщепленных пучков нейтронов в опыте типа Штерна–Герлаха, если поляризованные вдоль оси  $x$  нейтроны движутся вдоль оси  $z$ , а магнитное поле  $\mathbf{B}$  направлено в плоскости  $xy$  под углом  $\alpha = 45^\circ$  к оси  $x$ .

**28.9.** Распад  $\Lambda \rightarrow p\pi^-$  (Фейнмановские лекции по физике. Вып. 9, гл. 15, § 5).

**28.9.** Спин в магнитном поле (задачи 7.40-7.42 и 7.44 ГКК).

Найти операторы скорости  $\hat{v}$  и ускорения  $\hat{a}$  (в шредингеровском представлении) нейтральной частицы (например, нейтрона), находящейся в магнитном поле.

Найти зависимость от времени спиновой функции и средних значений компонент спина нейтральной частицы со спином  $s = 1/2$  и магнитным моментом  $\mu$ , находящейся в однородном постоянном магнитном поле  $\mathbf{B}$ .

Обобщить результат предыдущей задачи на случай однородного непостоянного магнитного поля, направление которого остается неизменным, т. е.  $B(t) = B(t) n_0$ .

Частица со спином  $s = 1/2$  и магнитным моментом  $\mu$  находится в однородном магнитном поле  $B(t)$  вида

$$B_x = B_0 \cos \omega_0 t, \quad B_y = B_0 \sin \omega_0 t, \quad B_z = B_1,$$

где  $B_0, B_1, \omega_0$  – 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  $|B_1/B_0| \ll 1$ ; обратить внимание на резонансный характер зависимости вероятности “переворота” от частоты  $\omega_0$  в этом случае.

**28.10.** Сложение моментов  $\frac{1}{2} \times \frac{1}{2}$ ,  $1 \times 1$ ,  $1 \times \frac{1}{2}$  (в том числе с использованием таблиц коэффициентов Клебша-Гордана).

**28.11.** Найти среднее значение магнитного момента электрона в состоянии  $p_{1/2}$  с  $j_z = 1/2$  двумя способами: а) используя результаты предыдущей задачи; б) используя формулу усреднения векторного оператора.

**28.12.** Система состоит из двух спинов  $s_1 = s_2 = 1/2$ , взаимодействие которых имеет вид  $K s_1 s_2$ . Найти уровни энергии системы во внешнем магнитном поле  $B$ , если гироманнитные отношения равны  $g_1$  и  $g_2$ .

**28.13.** Найти правила отбора для матричных элементов дипольного  $\langle l' m' | x_j | l m \rangle$  и квадрупольного  $\langle l' m' | x_j x_k | l m \rangle$  моментов.

**28.14.** Найти в борновском приближении сечение рассеяния быстрых нейтронов кулоновским полем (Задача 13.43 ГКК, а также § 42 из книги Берестецкого, Лифшица и Питаевского “Квантовая электродинамика” (М.: Наука, 1989)).

## §29. Тождественность частиц

Благодаря отсутствию точной локализуемости в квантовой механике тождественность частиц приводит к их неразличимости. Поэтому

$$\psi(x_2, x_1) = e^{i\alpha} \psi(x_1, x_2).$$

Так как двухкратная перестановка двух частиц — тождественная операция, то

$$\psi(x_2, x_1) = \pm\psi(x_1, x_2).$$

Благодаря принципу суперпозиции, симметрия всех состояний физической системы одинакова.

Волновая функция **бозонов** симметрична относительно перестановок

$$\psi(x_2, x_1) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) + \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)], & a \neq b; \\ \psi_a(x_1)\psi_b(x_2), & a = b. \end{cases}$$

Волновая функция **фермионов** антисимметрична:

$$\psi(x_2, x_1) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) - \psi_a(x_2)\psi_b(x_1)], & a \neq b; \\ 0, & a = b. \end{cases}$$

Принцип Паули: **два фермиона не могут находиться в одном состоянии**. Он обеспечивает стабильность атома — системы электронов (частиц со спином 1/2).

В релятивистской квантовой теории поля доказывается теорема Паули о связи спина со статистикой: **частицы с целым спином — бозоны, частицы с полуцелым спином — фермионы**.

Составная частица, построенная из четного числа фермионов — бозон, из нечетного числа фермионов — фермион.

### §30. Уравнение Клейна–Фока–Гордона

Операторы

$$\hat{p}_0 = \frac{\hat{H}}{c} = \frac{i\hbar}{c} \frac{\partial}{\partial t} \quad \text{и} \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$$

образуют 4-мерный вектор

$$\hat{p}_\mu = i\hbar \left( \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\nabla \right) = i\hbar \partial_\mu.$$

Из классического соотношения для компонент 4-импульса релятивистской частицы

$$\left( p - \frac{e}{c} A \right)_\mu^2 = m^2 c^2,$$

где  $A_\mu = (A_0 = \varphi, \mathbf{A})$  — 4-потенциал электромагнитного поля, следует релятивистское волновое уравнение (1926 — 1927 г.)

$$\left[ \left( i \frac{\hbar}{c} \partial_t - \frac{e}{c} \varphi \right)^2 - \left( -i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \right] \Psi = m^2 c^2 \Psi. \quad (30.1)$$

Четырехмерная плотность тока

$$j_\mu = \frac{1}{2} \left\{ \Psi^* \left( i\hbar \partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) \Psi + \left( -i\hbar \partial_\mu \frac{e}{c} A_\mu \right) \Psi^* \cdot \Psi \right\}$$

сохраняется:

$$\partial_\mu j_\mu = 0.$$

Уравнение (30.1) и плотность тока  $j_\mu$  инвариантны относительно калибровочного преобразования (сравни с нерелятивистским случаем в §19)

$$A_\mu \rightarrow A_\mu - \partial_\mu f(x), \quad \Psi \rightarrow \Psi e^{ief(x)/\hbar c}, \quad (30.2)$$

где  $f(x)$  — произвольная функция.

Релятивистская поправка к закону дисперсии, то есть к зависимости энергии от импульса,

$$V = c\sqrt{m^2 c^2 + p^2} - mc^2 - \frac{p^2}{2m} \approx -\frac{(p^2)^2}{8m^3 c^2}$$

снимает вырождение по  $l$  в спектре кулоновой задачи, приводит к **тонкой структуре** уровней. Возникающая поправка к энергии равна (см. уравнения (10.1) и (17.2))

$$\begin{aligned} \Delta E_{nl} &= \langle nl | \hat{V} | nl \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \left\langle nl \left| \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} \right)^2 \right| nl \right\rangle = \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left\langle nl \left| \left( E_n + \frac{e^2}{r} \right)^2 \right| nl \right\rangle = -\frac{me^4}{2\hbar^2} \frac{\alpha^2}{n^3} \left( \frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} \right). \end{aligned} \quad (30.2)$$

Здесь

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$$

— безразмерная константа, постоянная тонкой структуры.

$$l = \left. \begin{array}{l} 2 \\ 1 \\ 0 \end{array} \right\} n = 3$$

$$l = \begin{array}{c} 1 \\ 0 \end{array} \left. \begin{array}{c} \text{-----} \\ \text{-----} \end{array} \right\} n = 2$$

$$l = 0 \text{-----} \left. \right\} n = 1$$

*Тонкая структура уровней атома водорода согласно (30.2).*

Однако реальный спектр атома водорода отличается от этого спектра. Причина в том, что уравнение (30.1) не учитывает спин электрона.

### §31. Уравнение Дирака

Естественное релятивистское обобщение уравнения Паули (см. §25)

$$(i\hbar\partial_t - e\varphi) \Psi = \frac{1}{2m} \left[ \boldsymbol{\sigma} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right]^2 \Psi$$

которое учитывает спин электрона, выглядит так:

$$\left\{ \left[ \gamma_0 \left( i\frac{\hbar}{c} \partial_t - e\varphi \right) - \boldsymbol{\gamma} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right]^2 - m^2 c^2 \right\} \Psi = 0, \quad (31.1)$$

где  $\gamma_\mu = (\gamma_0, \boldsymbol{\gamma})$  — некоторые матрицы. Оператор второго порядка {...} в левой части уравнения (31.1) факторизуется:

$$\left[ \gamma_\mu \left( i\hbar\partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) + mc \right] \left[ \gamma_\mu \left( i\hbar\partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) - mc \right].$$

Функция  $\Psi$  удовлетворяет уравнению (31.1), если она является решением уравнения первого порядка

$$\left[ \gamma_\mu \left( i\hbar\partial_\mu - \frac{e}{c} A_\mu \right) - mc \right] \Psi = 0. \quad (31.2)$$

Это и есть уравнение Дирака (1928 г.).

Сколько компонент у волновой функции  $\Psi$ ?

Бесконечно малый поворот 2-компонентного спинора на угол  $\theta$  вокруг оси  $\mathbf{n}$

$$\varphi' = \left( 1 + \frac{i}{2} \theta \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \right) \varphi$$

сохраняет  $P$ -инвариантность (то есть инвариантность относительно отражений), так как и момент  $\boldsymbol{\sigma}$ , и ось поворота  $\mathbf{n}$  — аксиальные

векторы; соответственно,  $\sigma_{\mathbf{v}}$  — скаляр. Но единственно возможное бесконечно малое преобразование Лоренца со скоростью  $\mathbf{v}$  для 2-компонентного спинора

$$\varphi' = (1 + \lambda \sigma_{\mathbf{v}}) \varphi$$

нарушает  $P$ -инвариантность, так как скорость  $\mathbf{v}$  — полярный вектор, а следовательно,  $\sigma_{\mathbf{v}}$  — псевдоскаляр (то есть меняет знак при отражении координат). Поэтому приходится вводить второй спинор  $\chi$ . Если

$$\hat{P} \varphi = \varphi, \text{ то } \hat{P} \chi = -\chi.$$

И тогда преобразование Лоренца вида

$$\varphi' = \varphi - \frac{1}{2} \sigma_{\mathbf{v}} \chi, \quad \chi' = \chi + \frac{1}{2} \sigma_{\mathbf{v}} \varphi$$

$P$ -инвариантность сохраняет.

Двухкомпонентные спиноры  $\varphi$  и  $\chi$  объединяются в 4-компонентный спинор, или биспинор

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}.$$

Найдём  $4 \times 4$  матрицы  $\gamma_{\mu}$ . Свободное уравнение Дирака  $(\gamma_{\mu} \hat{p}_{\mu} - mc) \Psi = 0$  под действием оператора  $\gamma_{\mu} \hat{p}_{\mu} + mc$  должно перейти в  $(\hat{p}^2 - m^2 c^2) \Psi = 0$ . Отсюда следует

$$\gamma_{\mu} \gamma_{\nu} + \gamma_{\nu} \gamma_{\mu} = 2g_{\mu\nu} I.$$

При отражении координат  $\hat{p}_0$  не изменяется, а  $\hat{\mathbf{p}}$  изменяет знак. Поэтому

$$\hat{P}(\gamma_0 \hat{p}_0 - \gamma_{\hat{\mathbf{p}}}) \Psi = (\gamma_0 \hat{p}_0 + \gamma_{\hat{\mathbf{p}}}) \hat{P} \Psi.$$

Таким образом, матрица  $\hat{P}$  удовлетворяет условиям

$$\hat{P} \gamma_0 = \gamma_0 \hat{P}, \quad \hat{P} \gamma = -\gamma \hat{P}.$$

Ясно поэтому, что  $\gamma_0 = \hat{P}$ . С другой стороны, по определению,

$$\hat{P} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi \\ -\chi \end{pmatrix},$$

так что

$$\gamma_0 = \hat{P} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}.$$

Из  $\hat{P}\gamma + \gamma\hat{P} = 0$  следует, что

$$\gamma = \begin{pmatrix} 0 & B \\ C & 0 \end{pmatrix}.$$

А соотношение

$$\gamma_m \gamma_n + \gamma_n \gamma_m = -2\delta_{mn} I$$

удовлетворяется, если  $B_n = -C_n = \sigma_n$ , где  $\sigma_n$  — матрицы Паули. Итак,

$$\gamma_0 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad \gamma = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}.$$

Функция  $\bar{\Psi} = \Psi^+ \gamma_0$  удовлетворяет уравнению<sup>1</sup>

$$\bar{\Psi}[\gamma_\mu(-i\partial_\mu - eA_\mu) - m] = 0,$$

где производная  $\partial_\mu$  действует налево. 4-мерная плотность тока

$$j_\mu = \bar{\Psi} \gamma_\mu \Psi$$

удовлетворяет уравнению непрерывности  $\partial_\mu j_\mu = 0$ .

Для дираковской частицы плотность вероятности равна

$$\rho = \Psi^+ \Psi,$$

а плотность тока —

$$\mathbf{j} = \Psi^+ \boldsymbol{\alpha} \Psi,$$

где матрицы

$$\boldsymbol{\alpha} = \gamma_0 \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}.$$

эрмитовы.

Уравнение Дирака и плотность дираковского тока, разумеется, инвариантны относительно калибровочного преобразования (30.2).

## Свободное движение дираковской частицы

Свободному движению соответствует плоская волна

$$\Psi(x) = u(p) e^{ip_\mu x^\mu},$$

где биспинор  $u(p)$  удовлетворяет системе алгебраических уравнений

$$(\gamma_\mu p_\mu - m) u(p) = 0.$$

---

<sup>1</sup>Здесь и ниже в §32 полагаем  $\hbar = 1, c = 1$ .

Для двухкомпонентных спиноров, через которые выражается

$$u = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix},$$

получаем систему уравнений

$$(E - m)\varphi - \sigma p \chi = 0, \quad \sigma p \varphi - (E + m)\chi = 0.$$

Эта система имеет ненулевое решение, если ее определитель равен нулю, то есть при условии

$$E^2 = p^2 + m^2.$$

Введём арифметический, положительный корень

$$\varepsilon = +\sqrt{p^2 + m^2}.$$

Существуют две возможности(рис. 12):

1.

$$E = \varepsilon, \quad \chi = \frac{\sigma p}{\varepsilon + m}\varphi.$$

При нормировке  $\varphi^+\varphi = 1, u^+u = 1,$

$$u_{\varepsilon p} = \sqrt{\frac{\varepsilon + m}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} \varphi \\ A\varphi \end{pmatrix}, \quad A = \frac{\sigma p}{\varepsilon + m}$$

2.

$$E = -\varepsilon, \quad u_{-\varepsilon, p} = \sqrt{\frac{\varepsilon + m}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} -A\chi \\ \chi \end{pmatrix}.$$

Четыре компоненты волновой функции соответствуют двум возможным ориентациям спина при двух возможных знаках энергии.

Исключить состояния с отрицательной энергией нельзя, так как в квантовой механике возможны переходы между состояниями. Дирак постулировал, что уровни с отрицательной энергией заполнены. Тогда переходов на них нет в силу принципа Паули. Дырка в дираковском море ведет себя как частица той же массы, что и электрон, но с противоположным зарядом, то есть является позитроном.

## **Рождение электрон-позитронных пар постоянным внешним электрическим полем**

Рождение электрон-позитронных пар внешним электрическим полем — замечательное предсказание релятивистской квантовой механики (Заутер, 1931 г.; Швингер, 1951 г.). Напряженности электрического поля, достаточно большие для реального наблюдения

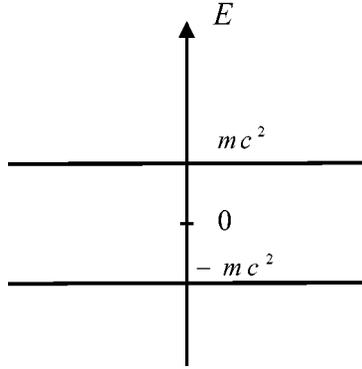


Рис. 12: Возможные значения энергии для свободной дираковской частицы:  $E = +\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} > mc^2$  и  $E = -\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} < -mc^2$ . Дираковской щели соответствует область энергий:  $-mc^2 < E < mc^2$

эффекта, достигаются в столкновениях атомных ядер с большими зарядами при сближении ядер на малые расстояния.

Мы рассмотрим модель явления, допускающую точное решение: случай однородного постоянного внешнего поля  $\mathcal{E}$ . Будет использовано представление о дираковском море, это резко упрощает решение задачи.

Начнем с расчета основной, экспоненциальной зависимости эффекта. Направим ось  $z$  вдоль постоянной силы  $F = -e\mathcal{E} = (0, 0, e\mathcal{E})$ , тогда потенциальная энергия  $U = -e\mathcal{E}z$ . При движении в таком поле сохраняется полная энергия  $E = \pm\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} - e\mathcal{E}z$  и поперечный импульс  $p_{\perp} = (p_x, p_y, 0)$ . В этом поле обычная дираковская щель (рис. 12) перекашивается (рис. 13). В результате электрон, который имел отрицательную энергию в отсутствие поля, может теперь протуннелировать сквозь щель (см. пунктирную линию на рис. 13) и уйти на бесконечность как обычная частица. Конечно, дырка, возникающая таким образом, — это не что иное как позитрон.

Пусть  $E = -\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} - e\mathcal{E}z$  — энергия частицы дираковского моря. Продольный импульс частицы

$$p_z(z) = \frac{1}{c} \sqrt{(e\mathcal{E}z + E)^2 - m^2c^4 - p_{\perp}^2c^2}$$

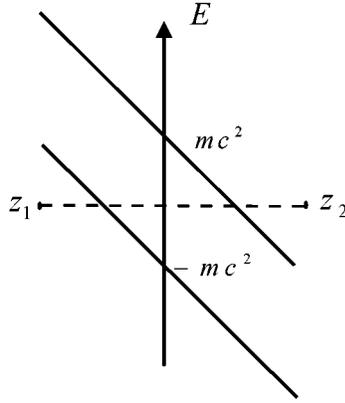


Рис. 13: Изменение дираковской щели при наличии постоянного электрического поля

обращается в нуль при

$$z_{1,2} = \frac{-E}{e\mathcal{E}} \mp \frac{\sqrt{m^2 c^4 + p_{\perp}^2 c^2}}{e\mathcal{E}}.$$

Исходная частица из дираковского моря входит в барьер в точке  $z = z_1$  и выходит из него при  $z = z_2$ . Подбарьерное действие легко находится

$$S = \int_{z_1}^{z_2} |p(z)| dz = \frac{\pi}{2} \frac{(m^2 c^2 + p_{\perp}^2) c}{e\mathcal{E}}.$$

В итоге экспоненциальный фактор в вероятности  $W$  подбарьерного перехода таков:

$$W \sim e^{-2S/\hbar} = \exp \left[ -\frac{\pi (m^2 c^2 + p_{\perp}^2) c}{e\mathcal{E}\hbar} \right]. \quad (31.3)$$

Заметим, что внешнее поле можно считать постоянным, если оно слабо меняется на подбарьерном пути. Отношение  $l/\bar{\lambda}$  длины этого пути  $l = z_2 - z_1 \sim mc^2/(eE)$  к комптоновской длине волны электрона  $\bar{\lambda} = \hbar/(mc)$  равно по порядку величины подбарьерному действию  $S$  в единицах  $\hbar$ , так что в квазиклассической ситуации  $l \gg \bar{\lambda}$ .

Вычислим теперь предэкспоненциальный фактор в вероятности рождения пар. Экспонента (31.3) — это вероятность того, что одна частица из дираковского моря, которая подходит слева к барьеру

(см. рис. 13), протуннелирует сквозь него, став, таким образом, реальным электроном. Рассмотрим исходные частицы в элементе импульсного пространства  $d^3p = d^2p_\perp dp_z$ , плотность которых равна  $dn = 2d^3p/(2\pi\hbar)^3$ , где множитель 2 соответствует двум возможным проекциям спина электрона. В единицу времени через площадку  $dx dy$  слева от барьера пройдет  $d\dot{N} = dj_z(z) dx dy$  частиц, где ток  $dj_z(z) = v_z(z) dn$ . В это выражение входит величина

$$v_z(z)dp_z = \frac{\partial E}{\partial p_z} dp_z = dE,$$

где частная производная берется при фиксированных значениях  $z$  и  $p_\perp$ . С другой стороны, как нетрудно сообразить, интервал энергий туннелирующих частиц  $dE$  прямо связан с интервалом  $dz$  продольных координат точек, в которых частицы входят в барьер:  $dE = e\mathcal{E} dz$  (с точностью до несущественного здесь знака). Чтобы получить полное число пар, рожденных в единицу времени в объёме  $dV = dx dy dz$ , экспоненту (31.4) следует домножить на  $d\dot{N}$ . В итоге полное число пар, рожденных в единицу времени в единице объёма, равно

$$P_{1/2} \equiv \frac{dW}{dt dV} = 2e\mathcal{E} \int \frac{d^2p_\perp}{(2\pi\hbar)^3} \exp \left[ -\frac{\pi(m^2c^2 + p_\perp^2)c}{e\mathcal{E}\hbar} \right].$$

Интегрируя это выражение по поперечным импульсам, находим окончательный ответ:

$$P_{1/2} = \frac{e^2\mathcal{E}^2}{4\pi^3\hbar^2c} \exp \left( -\frac{\pi m^2c^3}{e\mathcal{E}\hbar} \right). \quad (31.4)$$

Мы снабдили вероятности  $P$  в формулах, полученных выше, индексом  $1/2$ , чтобы подчеркнуть, что результат относится к частицам со спином половина. Разумеется, понятие моря Дирака, а с ним и наш подход, неприменимы сами по себе к рождению пар заряженных бесспиновых частиц, которые описываются уравнением Клейна–Фока–Гордона. Но в используемом квазиклассическом приближении вероятности рождения разного спина отличаются лишь числом спиновых состояний. Таким образом, вероятность рождения скалярных частиц, вычисленная в этом приближении, вдвое меньше:

$$P_0 = \frac{e^2\mathcal{E}^2}{8\pi^3\hbar^2c} \exp \left( -\frac{\pi m^2c^3}{e\mathcal{E}\hbar} \right). \quad (31.5)$$

Соответствующие точные результаты для постоянного электрического поля таковы:

$$P_{1/2} = \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{4\pi^3 \hbar^2 c} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \exp\left(-n \frac{\pi m^2 c^3}{e \mathcal{E} \hbar}\right),$$

$$P_0 = \frac{e^2 \mathcal{E}^2}{8\pi^3 \hbar^2 c} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n^2} \exp\left(-n \frac{\pi m^2 c^3}{e \mathcal{E} \hbar}\right).$$

Разумеется, учет высших членов, с  $n \geq 2$ , в этих суммах осмыслен лишь для очень сильных электрических полей, при  $\mathcal{E} \gtrsim m^2 c^3 / (e \hbar)$ . Для меньших полей формулы (31.4) и (31.5) верны количественно.

### Гамильтонова форма уравнения Дирака

Умножив уравнение (31.2) на  $\gamma_0$  слева, получим уравнение Дирака в гамильтоновой форме

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi, \quad \hat{H} = \boldsymbol{\alpha}(-i\nabla - e\mathbf{A}) + m\gamma_0 + eA_0.$$

Отсюда  $x$ -компонента скорости

$$\dot{x} = i[\hat{H}, x] = \alpha_x.$$

Так как  $\alpha_x^2 = I$ , то собственные значения  $\alpha_x$  равны  $\pm 1$ , или  $\pm c$  в обычных единицах. Однако собственные функции  $\alpha_x$  не соответствуют определенному знаку энергии, то есть обычным физическим состояниям. И наоборот, в состоянии с фиксированной энергией

$$\langle \alpha_x \rangle = u^+ \alpha_x u = \frac{p_x}{\varepsilon},$$

как и должно быть. Операторное уравнение движения во внешнем поле

$$\frac{d}{dt}(\hat{p} - e\mathbf{A}) = e\boldsymbol{\mathcal{E}} + e\boldsymbol{\alpha} \times \mathbf{B}$$

— аналог классического уравнения движения

$$\frac{d}{dt} \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1-v^2}} = e\boldsymbol{\mathcal{E}} + e\mathbf{v} \times \mathbf{B}.$$

В центральном поле орбитальный момент  $\hat{\mathbf{l}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}$  и спин

$$\hat{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}$$

в отдельности не сохраняются:

$$i[\hat{H}, \hat{\mathbf{l}}] = \boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}, \quad i[\hat{H}, \hat{\mathbf{s}}] = -\boldsymbol{\alpha} \times \hat{\mathbf{p}}.$$

Естественно, однако, что сохраняется полный момент  $\hat{\mathbf{j}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}$ .

## Сходство и различие уравнений Дирака и Клейна–Фока–Гордона

Применив оператор  $\gamma_\mu(i\partial_\mu - eA_\mu) + m$  к уравнению Дирака, квадривируем это уравнение:

$$\{(i\partial_\mu - eA_\mu)^2 - \frac{ie}{2}\gamma_\mu\gamma_\nu F_{\mu\nu} - m^2\}\Psi = 0, \quad F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu.$$

Отличие этого уравнения от уравнения Клейна–Фока–Гордона во втором спиновом слагаемом.

Рассмотрим движение заряженной частицы в постоянном (но не обязательно однородном) магнитном поле в отсутствие электрического поля. В этом случае спиновое слагаемое переходит в  $e\Sigma B$ . В силу квадривированного уравнения,

$$(\Sigma(\hat{p} - eA))^2 = (\hat{p} - eA)^2 - e\Sigma B = E^2 - m^2.$$

В магнитном поле, не зависящем от времени, энергия сохраняется. Поэтому в таком магнитном поле

$$\Sigma(p - eA) = \text{const}.$$

В квазиклассическом приближении  $p - eA$  совпадает с  $mv/\sqrt{1-v^2}$  и в магнитном поле, не зависящем от времени, по модулю сохраняется. Таким образом, в этом случае сохраняется и спиральность электрона, то есть проекция его спина на направление движения.

В действительности это утверждение нарушается за счет аномального магнитного момента электрона. Магнитный момент электрона равен

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc}(1 + \kappa), \quad \kappa \approx \frac{\alpha}{2\pi} \ll 1.$$

Эту поправку можно учесть в уравнении Дирака следующим образом:

$$\left[ \gamma_\mu(i\partial_\mu - eA_\mu) - m - \frac{ie\kappa}{4m}\gamma_\mu\gamma_\nu F_{\mu\nu} \right] \Psi = 0.$$

## Ультррелятивистский предел уравнения Дирака

Введем оператор

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} 0 & -I \\ -I & 0 \end{pmatrix}.$$

Он коммутирует с гамильтонианом, если в последнем пренебречь в ультрарелятивистском пределе массой:

$$\hat{H} = \boldsymbol{\alpha}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}) + e\varphi, \quad [\hat{H}, \gamma_5] = 0.$$

Собственные функции оператора  $\gamma_5$

$$\Psi_{L,R} = \frac{1}{2}(1 \pm \gamma_5) \Psi$$

выглядят так:

$$\Psi_{L,R} = \begin{pmatrix} \varphi_{L,R} \\ \mp \varphi_{L,R} \end{pmatrix},$$

где  $\varphi_{L,R} = \frac{1}{2}(1 \mp \boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})\varphi$  и  $\mathbf{n}$  — орт скорости. Очевидно,

$$(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{n})\varphi_{L,R} = \mp\varphi_{L,R},$$

то есть у  $\varphi_L$  (или  $\varphi_R$ ) спин антипараллелен (или параллелен) скорости. Отсюда названия  $L$  — левый,  $R$  — правый. В ультрарелятивистском пределе спиральность электрона сохраняется в произвольном внешнем электромагнитном поле. Действительно, уравнения для  $\varphi_{L,R}$  расщепляются:

$$\hat{H} \begin{pmatrix} \varphi_{L,R} \\ \mp \varphi_{L,R} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} eA_0 & \boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}) \\ \boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}) & eA_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{L,R} \\ \mp \varphi_{L,R} \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \varphi_{L,R} \\ \mp \varphi_{L,R} \end{pmatrix}$$

или

$$\boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})\varphi_{L,R} \mp eA_0\varphi_{L,R} = \varepsilon\varphi_{L,R}.$$

Вполне возможно, что нейтрино существует только левое, антинейтрино — только правое, а масса их равна нулю. Во взаимодействиях двухкомпонентного нейтрино четность не сохраняется.

## ВОПРОСЫ

**31.1.** Указать релятивистские единицы энергии, времени, длины, силы.

**31.2.** Чему равно (в эВ/см) критическое поле  $\mathcal{E}_0 = m^2c^3/(e\hbar)$ , при котором исчезает экспоненциальное подавление рождения пар внешним полем?

**31.3.** Зарядовое сопряжение (задачи 15.2, 15.3, 15.27 ГКК).

**31.4.** Найти  $[\hat{H}, \hat{\mathbf{l}}]$ ,  $[\hat{H}, \hat{\mathbf{s}}]$ ,  $[\hat{H}, \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}}]$ , где  $\hat{H} = \boldsymbol{\alpha}\mathbf{p} + \gamma_0m + U(r)$  (ср. с задачей 15.20 ГКК).

**31.5.** Используя тождество  $\langle n | [\hat{H}, \hat{p}r] | n \rangle = 0$ , где  $\hat{H} = \alpha p + \gamma_0 m - Ze^2/r$ , показать, что энергия  $E_n = \langle n | \gamma_0 | n \rangle$ .

**31.6.** Преобразование Лоренца для плоской волны, являющейся решением уравнения Дирака (задачи 15.25 и 15.26 ГКК).

**31.7.** Решение в виде плоской волны с определенными энергией, импульсом и спиральностью (задачи 15.21, 15.26 и 15.27 ИГГ).

**31.8.** Решение в виде плоской волны для нейтрино (задачи 15.28 и 15.29 ГКК).

**31.9.** Сечение рассеяния заряженной релятивистской частицы на кулоновом центре в борновском приближении (задачи 15.17 и 15.34 ГКК).

**31.10.** Электрон в однородном постоянном магнитном поле (задачи 15.11 и 15.33 ГКК).

## §32. Релятивистский электрон в кулоновом поле. Тонкая структура

Пусть релятивистский электрон рассеивается в кулоновом поле  $U(r) = -e^2/r$ , переходя из начального состояния  $\psi_i(r) = u_{\varepsilon p} \exp(ipr)$  в конечное состояние  $\psi_f(r) = u_{\varepsilon p'} \exp(ip'r)$ . Борновская амплитуда рассеяния с точностью до множителя равна фурье-образу потенциала взаимодействия (см. §21), или матричному элементу  $U_{fi}$

$$U_{fi} = \int \psi_f^\dagger(r) U(r) \psi_i(r) d^3r = -\frac{4\pi e^2}{q^2} u_{\varepsilon p'}^+ u_{\varepsilon p} =$$

$$= -\frac{4\pi e^2}{q^2} \varphi_f^+ \left\{ 1 - \frac{q^2}{4\varepsilon(\varepsilon + m)} + \frac{i[p' \times p] \sigma}{2\varepsilon(\varepsilon + m)} \right\} \varphi_i, \quad q = p' - p.$$

Выражение в фигурных скобках имеет вид

$$\{ \} = A + i\sigma n B, \quad n = \frac{p' \times p}{|p' \times p|},$$

где  $n$  — нормаль к плоскости рассеяния. Если выбрать  $n$  в качестве оси квантования спина (оси  $z$ ), то

$$\varphi_f^+ (A + i\sigma n B) \varphi_i \neq 0,$$

только если начальные и конечные проекции спинов на эту ось совпадают,  $m_i = m_f$ . Это делает тривиальным усреднение сечения по

поляризациям начального электрона и суммирование по поляризациям конечного электрона.

Если ограничиться в этом выражении первой релятивистской поправкой, положив  $\varepsilon = m$ , то мы получим

$$-4\pi e^2 \left\{ \frac{1}{q^2} - \frac{1}{8m^2} + \frac{i[\mathbf{q} \times \mathbf{p}]\boldsymbol{\sigma}}{4m^2 q^2} \right\}$$

(опускаем для кратности  $\varphi_f^\dagger$  и  $\varphi_i$ ). Отличия фурье-образа этой величины

$$-\frac{e^2}{r} + \frac{\pi e^2}{2m^2} \delta(r) + \frac{e^2}{4m^2 r^3} \mathbf{l}\boldsymbol{\sigma}$$

от кулонового потенциала  $U(r) = -e^2/r$  составляют релятивистскую поправку к взаимодействию электрона с ядром.

Второе, спин-орбитальное слагаемое в этой поправке можно качественно интерпретировать, как взаимодействие магнитного момента электрона  $\boldsymbol{\mu} = e\boldsymbol{\sigma}/(2m)$  в его собственной системе с магнитным полем  $\mathbf{B} = -\mathbf{v} \times \boldsymbol{\mathcal{E}}$ , возникающим в этой системе при движении электрона в электрическом поле ядра  $\boldsymbol{\mathcal{E}} = e\mathbf{r}/r^3$ . Первое,  $\delta$ -функциональное слагаемое в поправке также имеет спиновое происхождение, но является чисто квантовым.

Учитывая поправку  $-p^4/(8m^3)$  к зависимости энергии от импульса, получаем следующее выражение для релятивистского возмущения кулоновой задачи:

$$\hat{V} = -\frac{(\hat{p}^2)^2}{8m^3} + \frac{\pi e^2}{2m^2} \delta(r) + \frac{e^2}{4m^2 r^3} \hat{\mathbf{l}}\boldsymbol{\sigma}.$$

Уровни с одним и тем же  $l$ , но с разными полными моментами  $j$  не смешиваются этим возмущением, поскольку оно сохраняет полный момент. Уровни с одним и тем же  $j$ , но с разными  $l$  не смешиваются возмущением  $\hat{V}$ , поскольку оно сохраняет четность, а четность таких состояний противоположна. Таким образом, при вычислении релятивистской поправки к энергии можно пользоваться невырожденной теорией возмущений.

Среднее значение первого слагаемого было вычислено в аналогичной задаче для уравнения Клейна–Фока–Гордона (см. §30).

Среднее значение второго слагаемого отлично от нуля лишь при  $l = 0$ :

$$\langle njl | \delta(r) | njl \rangle = |\psi(0)|^2 \delta_{l0}.$$

Среднее значение последнего слагаемого отлично от нуля лишь при  $l \neq 0$ :

$$\left\langle njl \left| \frac{\hat{l}\sigma}{r^3} \right| njl \right\rangle = \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \cdot (1 - \delta_{l0}).$$

Величины  $|\psi(0)|^2$  и  $\langle 1/r^3 \rangle$  удобно вычислить, воспользовавшись тождеством

$$\langle njl | \hat{C} | njl \rangle = 0, \quad \hat{C} = \left[ \frac{d}{dr}, \hat{H}_r \right],$$

где

$$\hat{H}_r = -\frac{1}{2m} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - \frac{e^2}{r}$$

— гамильтониан радиального движения. Явное вычисление коммутатора дает

$$\hat{C} = \frac{1}{mr^2} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{mr^3} + \frac{e^2}{r^2}.$$

Значение  $\langle 1/r^2 \rangle$  было найдено ранее (см. (17.2)). Первое слагаемое в правой части можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \right\rangle &= \int d\Omega \int_0^\infty \psi^* \frac{1}{r^2} \frac{d\psi}{dr} r^2 dr = \\ &= \frac{1}{2} \int d\Omega \int_0^\infty \frac{d|\psi|^2}{dr} dr = -2\pi |\psi(0)|^2. \end{aligned}$$

для  $l \neq 0$ . Таким образом, находим

$$\langle njl | \delta(r) | njl \rangle = |\psi(0)|^2 = \frac{1}{\pi a_{\text{В}}^3 n^3} \delta_{l0},$$

$$\left\langle njl \left| \frac{1}{r^3} \right| njl \right\rangle = \frac{1}{a_{\text{В}}^3 n^3 l(l+1)(l+1/2)} (1 - \delta_{l0}).$$

В итоге поправка к энергии равна (в обычных единицах)

$$\Delta E_{nj} = -\frac{me^4 \alpha^2}{2\hbar^2 n^3} \left( \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right).$$

$$\left. \begin{array}{l} \text{-----} \quad 3d_{5/2} \\ \text{-----} \quad 3p_{3/2}, 3d_{3/2} \\ \text{-----} \quad 3s_{1/2}, 3p_{1/2} \end{array} \right\} n = 3$$

$$\begin{array}{c}
 \text{-----} \\
 \text{-----} \\
 \left. \begin{array}{l} 2p_{3/2} \\ 2s_{1/2}, 2p_{1/2} \end{array} \right\} n = 2 \\
 \\
 \text{-----} \\
 \left. \begin{array}{l} 2s_{1/2} \end{array} \right\} n = 1
 \end{array}$$

*Тонкая структура уровней атома водорода согласно уравнению Дирака.*

Видно, что сохраняется вырождение уровней с одинаковыми  $n$  и  $j$ .

## ВОПРОСЫ

**32.1.** Найти расщепление  $\alpha$ -линии серии Бальмера (переход с уровня  $n = 3$  на уровень  $n = 2$ ) с учетом тонкой структуры для уравнения Клейна–Фока–Гордона и уравнения Дирака.

**32.2.** Оценить с помощью соотношения неопределенности критическое значение  $Z_c$  заряда точечного ядра, при котором в релятивистской кулоновой задаче возникает падение на центр.

**32.3.** Пусть два точечных ядра с зарядами  $Z_1$  и  $Z_2$  находятся на расстоянии  $R$  друг от друга. При этом  $Z_1 < Z_c$ ,  $Z_2 < Z_c$ ,  $Z_1 + Z_2 > Z_c$ . Оценить, при каком  $R$  в задаче возникает падение на центр.

## §33. Атом в магнитном поле

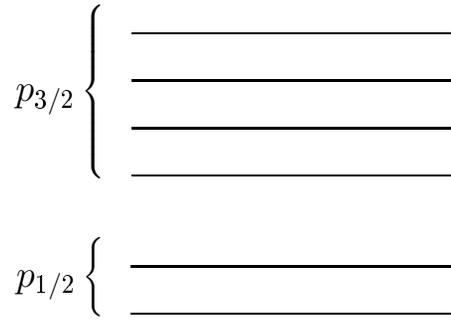
Выберем для постоянного и однородного внешнего магнитного поля  $\mathbf{B}$  калибровку, в которой вектор-потенциал  $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}$ . Тогда линейное по полю слагаемое в гамильтониане Паули преобразуется к виду

$$\hat{V}_1 = -\frac{e}{2mc} (\hat{\mathbf{p}}\mathbf{A} + \mathbf{A}\hat{\mathbf{p}}) - \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma}\mathbf{B} = -\frac{e\hbar}{2mc} (\hat{\mathbf{L}} + \boldsymbol{\sigma})\mathbf{B}.$$

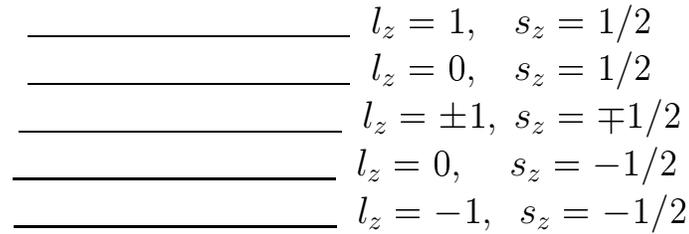
Для многоэлектронного атома получаем

$$\hat{V}_1 = -\frac{e\hbar}{2mc} \sum_a (\hat{\mathbf{l}}_a + \boldsymbol{\sigma}_a)\mathbf{B} = \frac{e\hbar}{2mc} (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}})\mathbf{B} = -\frac{e\hbar}{2mc} (\hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{S}})\mathbf{B},$$

где  $\hat{\mathbf{L}}$ ,  $\hat{\mathbf{S}}$ ,  $\hat{\mathbf{J}}$  — суммарный орбитальный, спиновый и полный моменты атома.



*Аномальный эффект Зеемана для одного p-электрона.*



*Нормальный эффект Зеемана для одного p-электрона.*

В слабом внешнем поле в качестве невозмущенных состояний можно использовать состояния с определенными значениями  $\hat{S}^2$ ,  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{J}^2$  и  $\hat{J}_z$ . Тогда поправка к энергии атома равна

$$\Delta E = \langle SLJJ_z | \hat{V}_1 | SLJJ_z \rangle = -\frac{e\hbar}{2mc} g J_z B,$$

где

$$g = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}$$

— фактор Ланде (см. §28). Это так называемый *аномальный эффект Зеемана*.

В сильном магнитном поле можно пренебречь тонкой структурой невозмущенных уровней и тогда

$$\Delta E = \langle SS_z LL_z | \hat{V}_1 | SS_z LL_z \rangle = -\frac{e\hbar}{2mc} (L_z + 2S_z) B.$$

Это так называемый *нормальный эффект Зеемана*.

В промежуточной области, когда энергия взаимодействия магнитного момента с полем сравнивается со спин-орбитальным вза-

имодействием, эти два взаимодействия нужно учитывать одновременно. Это так называемый *эффект Пашена-Бака*. Порядок величины критического поля  $B_c \sim 10^4$  Гс.

При  $L = S = 0$  работает лишь квадратичный член в гамильтониане

$$V_2 = \frac{e^2}{2mc^2} A^2 = \frac{e^2}{8mc^2} [\mathbf{r} \times \mathbf{B}]^2.$$

Поправка к энергии атома положительна и сводится с учетом сферической симметрии задачи ( $L = 0$ ) к

$$\Delta E = \frac{e^2 B^2}{12mc^2} \left\langle \sum_a r_a^2 \right\rangle.$$

В этом случае диамагнитная восприимчивость атома

$$\chi = -\frac{\partial^2 \Delta E}{\partial B^2} = -\frac{e^2}{6mc^2} \left\langle \sum_a r_a^2 \right\rangle.$$

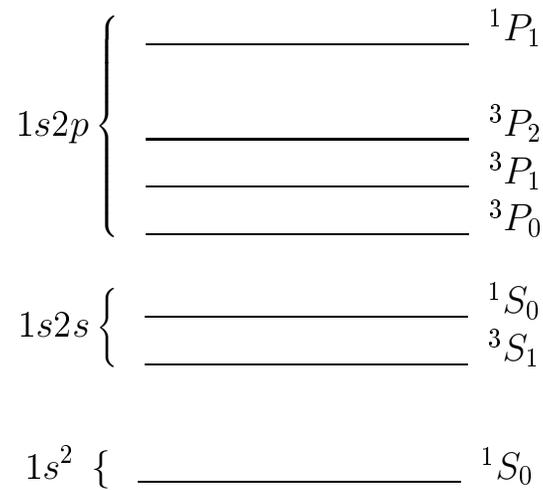
Если  $J = 0$ , но  $L = S \neq 0$ , то из-за малых интервалов тонкой структуры доминирует поправка второго порядка по  $V_1$ . Эта поправка к энергии основного состояния отрицательна, так что возникает своеобразный парамагнетизм в отсутствие исходного магнитного момента.

## ВОПРОС

**33.1.** Определить расщепления терма с  $S = 1/2$  в эффекте Пашена–Бака (КМ задача 1 к §113).

## §34. Атом гелия

Основное состояние  $1s^2$  симметрично по координатам. Поэтому оно, в силу принципа Паули, антисимметрично по спинам, то есть является синглетом  $^1S_0$ . В первой возбужденной конфигурации  $1s2s$  триплетное ортосостояние  $^3S_1$  лежит ниже синглетного парасостояния  $^1S_0$ . Действительно, волновая функция  $^3S_1$  симметрична по спинам, и поэтому антисимметрична по координатам, что уменьшает кулоновское отталкивание электронов. Во втором возбужденном состоянии  $1s2p$  снова триплетное состояние  $^3P$  лежит ниже синглетного  $^1P_1$  по той же причине. Последовательность  $^3P_0, ^3P_1, ^3P_2$  определяется положительным знаком спин-орбитального взаимодействия.



*Схема уровней атома гелия.*

Оценим с помощью соотношения неопределенности энергию основного состояния атома гелия. Естественно принять импульсы обоих электронов равными  $p_1 = p_2$ , а радиус-векторы равными и противоположными по направлению,  $r_1 = -r_2$ .

Тогда из гамильтониана

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|}$$

получаем следующую оценку для энергии:

$$E \sim \frac{p^2}{m} - \frac{7e^2}{2r}.$$

Минимизируя это выражение с учетом соотношения неопределенности, находим

$$E_{\min} \sim -\frac{49}{8} \text{ Ry} = -6,1 \text{ Ry}.$$

Это не так далеко от экспериментального значения

$$E_{\text{exp}} = -5.808 \text{ Ry}.$$

### §35. Вариационный принцип

Уравнение Шредингера  $\hat{H} \psi = E \psi$  следует из условия минимума функционала

$$\int \psi^* (\hat{H} - E) \psi dx.$$

Иначе это можно сформулировать как условие минимума функционала

$$\int \psi^* \hat{H} \psi dx$$

при дополнительном условии

$$\int \psi^* \psi dx = 1,$$

которое учитывается с помощью лагранжева множителя  $E$ .

Волновая функция основного состояния  $\psi_0$  соответствует абсолютному минимуму функционала. Волновая функция первого возбужденного состояния  $\psi_1$  следует искать на классе функций, ортогональных  $\psi_0$ . Волновая функция второго возбужденного состояния  $\psi_2$  должна быть ортогональна  $\psi_0$  и  $\psi_1$ , и т.д.

## ВОПРОС

**35.1.** Укажите классический аналог обсуждаемого вариационного принципа.

### Прямой вариационный метод

состоит в отыскании минимума функционала

$$E(\beta) = \int \psi^*(x, \beta) \hat{H} \psi(x, \beta) dx$$

на классе пробных функций заданного вида, зависящих от параметров  $\beta$ , и сводится фактически к отысканию минимума функции  $E(\beta)$ . Найденное таким образом приближенное собственное значение  $E$  лежит, очевидно, не ниже истинного.

Поясним сказанное следующей выкладкой. Разложим  $\psi(x, \beta)$  по собственным функциям гамильтониана  $\hat{H}$

$$\psi(x, \beta) = \sum_n c_n(\beta) \psi_n(x), \quad \hat{H} \psi_n(x) = E_n \psi_n(x),$$

где коэффициенты  $c_n(\beta)$  в силу условия нормировки удовлетворяют соотношению

$$\sum_n |c_n(\beta)|^2 = 1.$$

Используя это разложения, мы получим

$$E(\beta) = \sum_n E_n |c_n(\beta)|^2.$$

Отсюда видно, что  $E(\beta) \geq E_0$  и что  $E(\beta) = E_0$  если  $c_n(\beta) = \delta_{n0}$ .

Найдем прямым вариационным методом энергию гелиеподобного иона с зарядом ядра  $Ze$ . Гамильтониан системы

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|}.$$

Нормированную пробную функцию выберем в виде

$$\psi(r_1, r_2) = \psi(r_1) \psi(r_2), \quad \psi(r) = \sqrt{\frac{\beta^3}{\pi a_B^3}} e^{-\beta r/a_B}.$$

Следует ожидать, что вариационный параметр  $\beta$ , имеющий смысл эффективного заряда, окажется меньше  $Z$ , вследствие экранировки одним из электронов поля ядра для другого электрона. Вычисление дает

$$E(\beta) = 2 \left( \beta^2 - 2Z\beta + \frac{5}{8}\beta \right) \text{Ry}.$$

Минимум этой функции

$$E_0 = -2 \left( Z - \frac{5}{16} \right)^2 \text{Ry}$$

достигается при  $\beta = Z - 5/16$ . Для гелия ( $Z = 2$ ) получаем  $E_0 = -5,695 \text{Ry}$ . Превышение над истинным значением ( $-5.808 \text{Ry}$ ) всего 1,9 %.

Для иона  $\text{H}^-$  ( $Z = 1$ ) мы получили бы таким образом  $E_0 = -(121/128) \text{Ry}$ , что лежит выше энергии основного состояния атома водорода ( $-\text{Ry}$ ). Однако приближение слишком грубое, истинное значение энергии лежит ниже, чем  $(-\text{Ry})$ , так что устойчивый ион  $\text{H}^-$  существует.

## Метод Хартри–Фока

Для двухэлектронной задачи координатная пробная функция выбирается в виде

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_1(r_1)\psi_2(r_2) \pm \psi_1(r_2)\psi_2(r_1),$$

где верхний знак выбирается для синглетного, нижний — для триплетного состояния.

Для основного состояния гелия хартри-фоковская пробная функция такова:

$$\psi(r_1, r_2) = \psi(r_1)\psi(r_2).$$

Вариация функционала энергии по  $\psi^*(r_1)$  дает уравнение

$$\int dr_2 \psi^*(r_2) (\hat{H} - E) \psi(r_1) \psi(r_2) = 0,$$

или

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{2e^2}{r} + \int dr' \psi^*(r') \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta' - \frac{2e^2}{r'} + \frac{e^2}{|r - r'|} \right) \psi(r') \right\} \psi(r) = E \psi(r).$$

Это сложное интегро-дифференциальное уравнение решается численно.

## ВОПРОС

**35.1.** Найти по теории возмущений поправку к энергии атома He за счет взаимодействия электронов для состояний:  $1s^2$ ,  $2s^2$ ,  $1snl$ ,  $1s2s$ .

## §36. Метод Томаса–Ферми

Последовательное строгое изложение метода содержится в §70 книги Ландау и Лифшица “Квантовая механика”. Здесь же ограничимся нестрогими, но простыми рассуждениями.

С ростом заряда ядра, а следовательно, и числа электронов  $Z$ , радиус и объем атома существенно не изменяются (этот размер определяется внешним электроном, а он находится в экранированном поле ядра, которое оказывается того же порядка, что и поле в атоме водорода). Если в постоянный объем помещены  $Z$  электронов, то среднее расстояние между ними  $\sim a_B/Z^{1/3}$ .

Проведём чуть более аккуратное рассмотрение (используя атомную систему единиц). Пусть плотность электронов  $n(r) = Z^\alpha F(rZ^\beta)$ . Полное число электронов

$$Z = 4\pi \int_0^\infty dr r^2 n(r) = 4\pi Z^{\alpha-3\beta} \int_0^\infty dx x^2 F(x).$$

Средний радиус

$$\langle r \rangle = \frac{\int_0^\infty dr r^3 n(r)}{\int_0^\infty dr r^2 n(r)} \sim Z^{-\beta} \sim Z^{-1/3}.$$

Таким образом,  $\beta = 1/3$ , а плотность электронов имеет вид

$$n(r) = Z^2 F(rZ^{1/3}).$$

Потенциальная энергия такова:

$$U(r) = -\frac{Z}{r} f(rZ^{1/3}).$$

Так как при  $r < 1/Z^{1/3}$  ядро не экранируется электронами, то  $f(0) = 1$ .

Средний импульс электронов

$$\langle p \rangle \sim \sqrt{2T} \sim \sqrt{|U|} \sim \sqrt{Z/r} \sim Z^{2/3}$$

(по теореме о вириале кинетическая и потенциальная энергии,  $T$  и  $U$ , по модулю сравнимы).

Средний орбитальный момент

$$\langle l \rangle \sim \langle r \rangle \cdot \langle p \rangle \sim Z^{1/3}.$$

Полная энергия атома

$$E \sim -Z \cdot Z \cdot (Z^{-1/3})^{-1} = -Z^{7/3}.$$

Здесь первый множитель  $Z$  — число электронов, второй множитель  $Z$  — заряд ядра, третий множитель  $(Z^{-1/3})^{-1}$  — обратное среднее расстояние электрона от ядра.

Квазиклассическое рассмотрение отказывает на первой боровской орбите. Ее радиус  $\sim Z^{-1}$ , заряд ядра  $Z$  здесь неэкранирован, так что энергия этих электронов  $\sim Z^2$ . Эта поправка составляет  $Z^{-1/3}$  от полной энергии атома.

## ВОПРОСЫ

**36.1.** Оценки в модели Томаса–Ферми (задачи 11.29-11.31 и 11.33 ГКК).

**36.2.** Электронный газ большой плотности находится внутри непроницаемой сферы. Кулоновское отталкивание прижимает электроны к стенке. Оценить толщину слоя, в котором находятся электроны.

## §37. Таблица Менделеева

См. КМ §73.

## §38. Разные типы связи в атомах

В сложных атомах гамильтониан системы имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{a=1}^Z \frac{\hat{p}_a^2}{2m} + U_{\text{кул}} + \hat{V}_{\text{рел}}, \quad U_{\text{кул}} = - \sum_a \frac{Ze^2}{r_a} + \sum_{a<b} \frac{e^2}{|r_a - r_b|},$$

где потенциал  $U_{\text{кул}}$  учитывает кулоновское притяжение электронов к ядру и взаимное отталкивание электронов, а  $\hat{V}_{\text{рел}}$  учитывает релятивистские эффекты. При введении самосогласованного поля этот гамильтониан можно представить в виде суммы трех слагаемых

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{сам}} + \hat{V}_{\text{ост}} + \hat{V}_{\text{рел}}.$$

Здесь первое слагаемое  $\hat{H}_{\text{сам}}$  отвечает самосогласованному центральному полю  $V_{\text{сам}}(r)$ , в котором движутся невзаимодействующие электроны,

$$\hat{H}_{\text{сам}} = \sum_{a=1}^Z \hat{H}_a, \quad \hat{H}_a = \frac{\hat{p}_a^2}{2m} + V_{\text{сам}}(r_a).$$

В поле  $V_{\text{сам}}(r)$  определяются одноэлектронные уровни энергии  $E_{nl}$ , которые и заполняются электронами с учетом принципа Паули. Возникает определенная *электронная конфигурация*, которая в грубом приближении описывает уровни энергии атома.

Остаточное кулоново взаимодействие между электронами

$$\hat{V}_{\text{ост}} = U_{\text{кул}} - \sum_a V_{\text{сам}}(r_a)$$

учитывает отличие реального поля от самосогласованного поля. В таком поле сохраняется полный орбитальный момент импульса  $L$  и его проекция  $M_L$ , а также полный спин  $S$  и его проекция  $M_S$ . Как и в случае самосогласованного поля, остаточное взаимодействие между электронами не имеет прямой зависимости от спиновых состояний электронов, но оно, конечно, зависит от симметрии координатной волновой функции, а следовательно (вследствие принципа Паули), и от полного спина  $S$ . Таким образом, с учетом  $\hat{V}_{\text{ост}}$  уровни энергии атома  $E_{SL}$  зависят от  $S$  и  $L$ , но не зависят от проекций  $M_S$  и

$M_L$ , а потому не зависит и от полного момента  $J = L + S$ . Порядок величины остаточного взаимодействия — обычная атомная энергия,  $Ry$ ; однако численно оно заметно меньше.

Последнее слагаемое  $\hat{V}_{\text{рел}}$  определяет релятивистские эффекты — ср. формулу (32.1) для релятивистских поправок в атоме водорода. Наиболее важным из этих эффектов является спин-орбитальное взаимодействие, имеющее вид

$$\hat{V}_{ls} = \sum_a A(r_a) \hat{l}_a \hat{s}_a, \quad (38.1)$$

где  $\hat{l}_a$  и  $\hat{s}_a$  — операторы орбитального и спинового момента электрона, а функция  $A(r_a)$  приближенно выражается через потенциальную энергию самосогласованного поля. Для одного электрона в кулоновом поле с зарядом  $Ze$  эта функция согласно (32.1) равна

$$A(r) = \frac{Ze^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{r^3}. \quad (38.2)$$

Спин-орбитальное взаимодействие релятивистское по природе и составляет поэтому величину  $\sim (v/c)^2$  в атомных единицах. Это взаимодействие пропорционально  $r^{-3}$  и формируется на малых расстояниях  $\sim a_B/Z$  от ядра, где кулоново поле ядра неэкранировано и  $v/c \sim Z\alpha$ . Таким образом, относительная величина спин-орбитального взаимодействия  $\sim Z^2 \alpha^2$ . В тяжелых атомах оно сравнивается с остаточным кулоновым взаимодействием.

### Случай $LS$ связи

В легких атомах, где остаточное кулоново взаимодействие доминирует по сравнению со спин-орбитальным взаимодействием,  $|V_{\text{ост}}| \gg |V_{\text{рел}}|$ , сохраняющимися величинами являются полный спин  $S$  и полный орбитальный момент импульса  $L$ . При этом разность уровней энергии с различными  $S$  и  $L$  велика по сравнению с интервалами тонкой структуры, определяемыми возмущением  $\hat{V}_{ls}$ . В этом случае говорят об  $LS$ -типе связи. При определении расположения уровней  $E_{SLJ}$  для данной электронной конфигурации имеют место

#### Правила Хунда:

1. Энергия состояние тем ниже, чем больше  $S$  (ибо чем более симметрична спиновая функция, тем более антисимметрична коор-

динатная и тем слабее остаточное кулоново отталкивание электронов). Замкнутая оболочка (основное состояние благородных газов) — синглет,  $S = 0$ .

2. Энергия состояния тем ниже, чем больше  $L$  (при данном  $S$ ). Ниже будет показано на примере конфигурации  $p^2$ , что при бóльшем  $L$  кулоново отталкивание электронов слабее.

3. Энергия состояние тем ниже, чем меньше  $J$  для оболочки, заполненной менее чем наполовину (при данных  $S$  и  $L$ ). В такой оболочке энергия растет с ростом  $J$ , что является следствием роста энергии при увеличении  $j$  для одного электрона. Для дырки знак спин-орбитального взаимодействия обратный. Поэтому если оболочка заполнена больше чем наполовину, то энергия с ростом  $J$  падает. (Кстати, отсюда ясно, что для оболочки, заполненной ровно наполовину, спин-орбитальное расщепление в первом порядке отсутствует.)

Последнее правило Хунда связано с учетом спин-орбитального взаимодействия. Усредняя возмущение (38.1) по состояниям с определенными значениями  $S$  и  $L$ , мы получим оператор возмущения в виде

$$\langle LS | \hat{V}_{ls} | LS \rangle = A_{LS} \hat{L}\hat{S},$$

где постоянная  $A_{LS} \gtrless 0$  для электронной оболочки, заполненной менее (более) чем наполовину. Тонкую структуру уровней найдем, используя теорию возмущений, причем в качестве волновых функций нулевого приближения можно взять состояния с определенным значением полного момента  $J$ :

$$\begin{aligned} E_{SLJ} &= E_{SL} + A_{LS} \langle LSJ | \hat{L}\hat{S} | LSJ \rangle = \\ &= E_{SL} + A_{LS} \frac{1}{2} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]. \end{aligned}$$

### Случай $jj$ связи

Рассмотрим теперь противоположный случай, когда спин-орбитальное взаимодействие существенно больше остаточного,  $|V_{\text{ост}}| \ll |V_{\text{рел}}|$ . Без учета  $V_{\text{ост}}$  гамильтониан атома соответствует набору невзаимодействующих электронов, каждый из которых движется в потенциале

$$V_{\text{сам}}(r_a) + A(r_a) \hat{l}_a \hat{s}_a.$$

В таком поле сохраняется полный момент импульса отдельного электрона  $j = l \pm 1/2$  и его проекция  $m_j$ . Из состояний  $|nljm_j\rangle$  отдельных электронов строится (с учетом принципа Паули) состояние атома с определенными  $J$  и  $M_J$ . По этим последним состояниям и находятся поправки к энергии атома за счет возмущения  $V_{\text{ост}}$ .

Следует отметить, что случай  $jj$  связи в чистом виде не встречается, для тяжелых атомов имеется промежуточная ситуация, когда  $V_{\text{ост}}$  и  $V_{ls}$  имеют близкий порядок величины.

### Пример: конфигурация $p^2$

*Случай  $LS$  связи.* По принципу Паули, состояние с  $S = 1$ , симметричное по спиновым переменным, антисимметрично по координатам и поэтому имеет  $L = 1$ . По аналогичной причине синглетные состояния с  $S = 0$  имеют  $L = 0, 2$ . В силу первого и третьего правил Хунда три нижних состояния — это  ${}^3P_{0,1,2}$ .

Что касается синглетных уровней,  ${}^1S_0$  и  ${}^1D_2$ , то их радиальные волновые функции одинаковы (мы пока пренебрегаем остаточным кулоновым взаимодействием между электронами). Сравним поэтому их угловые функции  $\psi_{LM}$ . Угловая функция  $a$ -го  $p$ -электрона  $Y_{1m}(n^{(a)})$  зависит от компонент единичного радиус-вектора  $n^{(a)} = r_a/r_a$  (см. §14). Волновая функция состояния  ${}^1S_0$ , естественно, является скаляром

$$\psi_{00} = \frac{\sqrt{3}}{4\pi} n^{(1)} \cdot n^{(2)}.$$

В качестве представителя  ${}^1D_2$  состояний выберем, например, состояние с  $L_z = +2$ , это просто произведение одноэлектронных волновых функций, каждая из которых соответствует  $l_z = +1$ ,

$$\psi_{22} = Y_{11}(n^{(1)}) \cdot Y_{11}(n^{(2)}) = \frac{3}{8\pi} (n_x^{(1)} + in_y^{(1)}) \cdot (n_x^{(2)} + in_y^{(2)}).$$

Наиболее существенный вклад в энергию отталкивания электронов  $e^2/|r_1 - r_2|$  дает область близких значений их координат, когда  $r_1 \approx r_2$ . Рассмотрим предельный случай, когда координаты электронов совпадают. При  $n^{(1)} = n^{(2)}$  отношение

$$\frac{|\psi_{22}|^2}{|\psi_{00}|^2} = \frac{3}{4} (n_x^2 + n_y^2)^2.$$

Даже максимальное значение этого отношения,  $3/4$ , меньше 1. Отсюда ясно, что кулоново отталкивание в  $D$ -состоянии меньше, чем в  $S$ , так что энергия  $D$ -состояния, действительно, меньше.

Итак, в  $LS$  схеме расположение уровней в порядке возрастания энергии таково:

$${}^3P_{0,1,2}; \quad {}^1D_2; \quad {}^1S_0. \quad (38.3)$$

*Случай  $jj$  связи.* Чтобы найти расположение уровней конфигурации  $p^2$  при больших  $Z$ , когда спин-орбитальное взаимодействие становится сравнимым с остаточным кулоновым взаимодействием, удобно рассмотреть сначала случай предельно большого спин-орбитального взаимодействия, когда электрон характеризуется лишь полным моментом  $j$ , равным для  $p$ -электрона  $1/2$  или  $3/2$ . Состояние двух  $p$ -электронов будем описывать набором  $(j_1 j_2)_J$ , в котором полный момент  $J = 0, 1, 2$ . Тогда возможные состояния таковы:

$$\left(\frac{11}{22}\right)_0; \quad \left(\frac{13}{22}\right)_1, \quad \left(\frac{13}{22}\right)_2; \quad \left(\frac{33}{22}\right)_0, \quad \left(\frac{33}{22}\right)_2. \quad (38.4)$$

Действительно, при  $j_1 = j_2 = 1/2$  нельзя организовать состояние с  $J = 1$ , так как состояние с  $J_z = \pm 1$  невозможно в силу принципа Паули. По такой же причине (невозможно получить  $J_z = \pm 3$ ) состояния  $j_1 = 3/2, j_2 = 3/2$  не складываются в  $J = 3$ . Состояние  $\left(\frac{33}{22}\right)$  с  $J_z = +1$  можно организовать единственным образом: из одноэлектронных проекций  $-1/2$  и  $+3/2$ . Но одно такое состояние должно относиться к  $J = 2$ , так что и состояние  $\left(\frac{33}{22}\right)_1$  не осуществляется. Поскольку электрон с большим  $j$  имеет большую энергию, то последовательность уровней в порядке возрастания энергии прямо соответствует (38.3), причем запятой разделены состояния, вырожденные по энергии.

Подчеркнем, что число состояний с заданным полным моментом  $J$  одно и то же в любой схеме сложения моментов.

Сравнение (38.3) с (38.4) показывает, что в случае, промежуточном между  $LS$  связью и  $jj$  связью, уровни располагаются в следующем порядке:

$$J = 0; \quad J = 1; \quad J = 2; \quad J = 2; \quad J = 0.$$

Здесь состояния с  $J = 0$  — ортогональные линейные комбинации  ${}^3P_0$  и  ${}^1S_0$  или

$$\left(\frac{11}{22}\right)_0 \quad \text{и} \quad \left(\frac{33}{22}\right)_0.$$

Аналогично, состояния с  $J = 2$  — ортогональные линейные комбинации  ${}^3P_2$  и  ${}^1D_2$  или

$$\begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}_2 \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}_2.$$

## ВОПРОСЫ

**38.1.** Возможные термы конфигураций электронов  $nsn'p$ ;  $nprn'p$ ;  $p^3$ ;  $d^2$  (задачи 11.12 и 11.20 ГКК).

**38.2.** Квантованные колебания поверхности атомного ядра имеют момент 2. Какие полные моменты допустимы для состояний, в которых имеются два или три таких кванта? Чему равно полное число состояний системы  $N$  квантов (с учетом разных значений проекции полного момента)?

**38.3.** Найти термы и магнитные моменты основных состояний атомов P, Cr, S, V, Al, Fe, Cl, Ti.

**38.4.** Рассмотрим следующую модель. Пусть электроны находятся в притягивающем кулоновом (или ньютоновом) поле ядра, а остаточное взаимодействие между ними не отталкивающее, а притягивающее (гравитационный атом). Изменяются ли для такой системы первое и второе правила Хунда?

## §39. Сверхтонкая структура (СТС)

СТС обусловлена взаимодействием магнитного момента электрона, орбитального и спинового, с магнитным моментом ядра. Заметно меньший вклад в СТС дают высшие мультипольные моменты ядра — электрический квадрупольный и магнитный октупольный.

Грубая оценка магнитной СТС:

$$\Delta E \sim \left\langle \frac{\mu_e \mu_p}{r^3} \right\rangle \sim \frac{e\hbar}{2mc} \frac{e\hbar}{m_p c} \frac{1}{a_B^3} \sim \alpha^2 \frac{m}{m_p} \text{Ry}.$$

Первый множитель,  $\alpha^2$ , отражает релятивистскую природу эффекта; отношение масс электрона и протона,  $m/m_p$ , — это оценка отношения магнитных моментов ядра и электрона.

Для расчета СТС используем взаимодействие

$$\hat{V} = -\frac{e}{2mc} (\hat{p}\hat{A} + \hat{A}\hat{p} + \hbar\boldsymbol{\sigma}\hat{B}),$$

следующее из уравнения Паули. Здесь

$$\hat{A} = \frac{\hat{\boldsymbol{\mu}} \times \mathbf{r}}{r^3} = \nabla \frac{1}{r} \times \hat{\boldsymbol{\mu}}$$

— вектор-потенциал, создаваемый магнитным моментом ядра  $\hat{\boldsymbol{\mu}}$ . Магнитное поле ядра равно

$$\hat{B} = \nabla \times \hat{A} = \frac{3\mathbf{n}(\mathbf{n}\hat{\boldsymbol{\mu}}) - \hat{\boldsymbol{\mu}}}{r^3} + \frac{8\pi}{3}\hat{\boldsymbol{\mu}}\delta(r), \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}}{r}.$$

Взаимодействие сводится к виду

$$\hat{V} = -\frac{e\hbar}{2mc} \left[ \frac{2\hat{\boldsymbol{\mu}}\hat{l}}{r^3} + \frac{3\mathbf{n}(\mathbf{n}\boldsymbol{\sigma})(\mathbf{n}\hat{\boldsymbol{\mu}}) - \boldsymbol{\sigma}\hat{\boldsymbol{\mu}}}{r^3} + \frac{8\pi}{3}\hat{\boldsymbol{\mu}}\boldsymbol{\sigma}\delta(r) \right].$$

В водороде  $\hat{\boldsymbol{\mu}}$  — магнитный момент протона:

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = 2,79 \cdot \frac{|e|\hbar}{2m_p c} \boldsymbol{\sigma}_p,$$

где  $(1/2)\boldsymbol{\sigma}_p$  — спин протона. Поправка к энергии  $s$ -состояния равна

$$\Delta E = \frac{|e|\hbar}{2mc} \frac{8\pi}{3} \frac{1}{\pi a_B^3 n^3} 2,79 \frac{|e|\hbar}{2m_p c} \langle \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}_p \rangle.$$

Здесь

$$\langle \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\sigma}_p \rangle = 2F(F+1) - 3,$$

где  $\hat{F} = \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma}_p)$  — полный момент атома. Сверхтонкое расщепление основного состояния атома водорода, то есть разность энергий состояний с  $F = 1$  и  $F = 0$ , составляет, таким образом,

$$\Delta E \equiv E(F=1) - E(F=0) = 2,79 \cdot \frac{16}{3} \alpha^2 \frac{m}{m_p} \text{Ry},$$

что соответствует радиодиапазону  $\Delta E/(2\pi\hbar) = 1420$  МГц или длине волны 21 см.

Оценим зависимость СТС от  $Z$  в сложных атомах, сравнив ее с тонкой структурой. Как было показано раньше, тонкая структура растет  $\sim Z^2\alpha^2$ . Но спин-орбитальное взаимодействие обусловлено электрическим полем ядра, которое пропорционально  $Z$ , а стс — магнитным полем ядра, которое от  $Z$  не зависит. Таким образом, оценка для СТС в атомных единицах составляет

$$Z\alpha^2 \frac{m}{m_p}.$$

## ВОПРОСЫ

**39.1.** Найти СТС для основного состояния атома водорода, вычисляя непосредственно  $V(0)$  — магнитное поле, создаваемое электроном в области ядра.

**39.2.** Сравнить СТС водорода и дейтерия.

**39.3.** Найти расщепление уровней с  $n = 1$  для атома водорода в магнитном поле, если энергия взаимодействия с полем сравнима с интервалами сверхтонкой структуры. Оценить необходимую для этого напряженность магнитного поля.

**39.4.** Терм  $D_{5/2}$  в оптическом спектре  $^{39}_{19}\text{K}$  имеет сверхтонкую структуру, состоящую из четырех компонент. Каково значение спина ядра? Какое следует ожидать соотношение интервалов в сверхтонком квартуплете?

## §40. Изотопический сдвиг

Эффект массы обусловлен изменением массы ядра  $M$  от изотопа к изотопу.

В водороде приведенная масса равна

$$\mu = \frac{mM}{m+M} \approx m\left(1 - \frac{m}{M}\right).$$

Относительная разность уровней водорода и дейтерия составляет

$$\frac{\Delta E}{E} = \left(\frac{m}{m_p} - \frac{m}{2m_p}\right) = \frac{m}{2m_p} \approx 2 \cdot 10^{-4}.$$

В многоэлектронных атомах удобно начать с кинетической энергии ядра  $P^2/(2M)$ . Импульс ядра  $P$  равен с обратным знаком сумме импульсов электронов:  $P = -\sum_n p_n$ . Сдвиг составляет

$$\Delta E_M = -\frac{\Delta M}{2M^2} \left(\sum_n p_n\right)^2 = -\frac{\Delta A}{A^2} \frac{1}{2m_p} \left(\sum_n p_n^2 + \sum_{n \neq m} p_n p_m\right).$$

Оценка величины эффекта здесь такова:

$$\Delta E_M \sim \frac{\Delta A}{A^2} \frac{m}{m_p} R_y,$$

где  $A$  — атомный номер ядра.

Эффект объема обусловлен изменением радиуса ядра от изотопа к изотопу и соответствующим изменением электростатического потенциала ядра. Расчет (см.: КМ §120) дает следующую зависимость соответствующей поправки к энергии от радиуса ядра  $R$ :

$$\frac{2\pi}{5} Z e^2 R^2 |\psi(0)|^2.$$

У ядер  $R \approx A^{1/3} r_0$ , где  $r_0 = 1,2 \cdot 10^{-13}$  см. Разность уровней составляет

$$\Delta E_V \sim \Delta A \cdot A^{-1/3} Z^2 \left( \frac{r_0}{a_B} \right)^2 \text{ Ry},$$

еще один множитель  $Z$  возник здесь от  $|\psi(0)|^2$  (см.: КМ §71).

Отношение эффекта объема к эффекту массы таково:

$$\frac{\Delta E_V}{\Delta E_M} \sim Z^2 A^{5/3} \frac{m_p}{m} \left( \frac{r_0}{a_B} \right)^2 \sim 10^{-6} Z^{11/3},$$

напомним, что  $A \approx 2Z$ . Начиная с  $Z \sim 40$ , эффект объема обычно доминирует.

Исследование изотопического смещения в тяжелых атомах и сверхтонкой структуры — источник ценной информации о свойствах атомных ядер.

## §41. Нестационарная теория возмущений

(См.: КМ §§40-42).

### **Пример. Возбуждение атома водорода пролетающим ионом**

Ион считается настолько тяжелым, что траектория его  $R(t)$  прямолинейна, заряд иона  $Ze$ . Возмущение  $V(t)$  складывается из взаимодействия с электроном и с ядром:

$$V(t) = -\frac{Ze^2}{|R(t) - r_e|} + \frac{Ze^2}{|R(t) - r_p|}, \quad R(t) = \rho + vt.$$

Относительно прицельного параметра  $\rho$  предполагаем, что  $\rho \gg a_B$ . Тогда

$$V(t) = -\frac{Ze^2 R r}{R^3} = -Ze^2 \frac{xvt + y\rho}{(\rho^2 + v^2 t^2)^{3/2}},$$

где  $r = r_e - r_p$  — обычная атомная координата. По правилам отбора, это возмущение вызывает переходы из основного  $s$ -состояния в  $p$ -состояния с  $l_z = \pm 1$ . Ограничимся состоянием  $2p$  и рассмотрим сначала  $l_z = +1$ . Тогда

$$\frac{1}{\hbar} \int_0^\infty dt e^{i\omega t} V_{21}(t) = \frac{2^7}{3^5} \frac{Ze^2}{\hbar v} \frac{a_B}{\rho} \int_{-\infty}^\infty d\xi e^{i\omega\tau\xi} \frac{-i + \xi}{(1 + \xi^2)^{3/2}}.$$

Здесь  $\tau = \rho/v$  — характерное время пролета,  $\omega = (E_2 - E_1)/\hbar$  — частота перехода.

1. Быстрый ион,  $\omega\tau \ll 1$ ,  $e^{i\omega\tau\xi} \approx 1$ . В результате интегрирования получаем

$$-i \frac{2^8}{3^5} \frac{Ze^2}{\hbar v} \frac{a_B}{\rho}.$$

Если  $\rho$  достаточно велико, то эта величина мала при любом  $Ze^2/(\hbar v)$  и теория возмущения применима. Вероятность перехода (с учетом удвоения от вклада  $l_z = -1$ )

$$W(\rho) = \frac{2^{17}}{3^{10}} \left( \frac{Ze^2}{\hbar v} \right)^2 \frac{a_B^2}{\rho^2}.$$

2. Медленный ион,  $\omega\tau \gg 1$ . Интеграл по  $\xi$  вычисляется с помощью перехода в комплексную плоскость и оказывается, как и следовало ожидать, экспоненциально малым:

$$W(\rho) = \frac{2^{17}}{3^9} \pi \left( \frac{Ze^2}{\hbar v} \right)^2 \frac{a_B^8}{\rho^8} \left( \frac{e^2}{\hbar v} \right)^{-1} e^{-2\omega\tau}.$$

Полное сечение возбуждения равно

$$\sigma = 2\pi \int_{\rho_{\min}}^{\rho_{\max}} d\rho \rho W(\rho).$$

Из-за экспоненциального падения на больших  $\rho$  можно принять  $\rho_{\max} \approx v/\omega$ .

По пределу применимости, во всяком случае  $\rho_{\min} \gg a_B$ . Если  $v \gg v_{\text{атом}}$ , то есть  $e^2/(\hbar v) \ll 1$  (при этом  $Ze^2/(\hbar v)$  может быть немалым), то сечение с логарифмической точностью по параметру  $\hbar v/e^2$  вычисляется:

$$\sigma \approx 2\pi \int_{a_B}^{v/\omega} d\rho \rho W(\rho) = \frac{2^{18}}{3^{10}} \left( \frac{Ze^2}{\hbar v} \right)^2 \pi a_B^2 \ln \frac{\hbar v}{e^2}.$$

## §42. Фотоэффект

Пусть на атом водорода, находящийся в основном состоянии  $\psi_i(r) = e^{-r/a} / \sqrt{\pi a^3}$ ,  $a = \hbar^2 / (me^2)$  с энергией  $E_i = -Ry$ , падает плоская монохроматическая волна, описываемая 4-потенциалом

$$\varphi = 0, \quad A(r, t) = A_0 e^{i(kr - \omega t)} + A_0^* e^{-i(kr - \omega t)}, \quad \omega = c|k|, \quad kA_0 = 0.$$

Найдем сечение фотоэффекта, предполагая, что скорость выбитого электрона  $v = p/m$  велика по сравнению с атомной, но мала по сравнению со скоростью света:  $e^2/\hbar \ll v \ll c$ . Такой электрон мож-

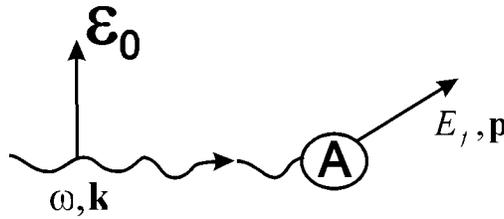


Рис. 14: Схема фотоэффекта

но считать свободным, так что его волновая функция  $\psi_f(r) = e^{i\mathbf{p}r/\hbar}$ , а его энергия

$$E_f = \frac{p^2}{2m} = \hbar\omega + E_i \approx \hbar\omega.$$

При этом переданный импульс  $\hbar\mathbf{q} = \mathbf{p} - \hbar\mathbf{k} \approx \mathbf{p}$ , так как

$$\frac{\hbar k}{p} \approx \frac{p^2}{2mcp} = \frac{v}{2c} \ll 1.$$

Оператор возмущения атома полем фотона

$$\hat{V}(r, t) = -\frac{e}{mc} A(r, t) \hat{p}$$

представим в виде

$$\hat{V}(r, t) = \hat{F} e^{-i\omega t} + \hat{F}^+ e^{i\omega t}, \quad \hat{F} = -\frac{e}{mc} A_0 e^{i\mathbf{k}r} \hat{p},$$

где оператор  $\hat{F}$  определяет вероятность выбивания электрона в единицу времени

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |F_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Матричный элемент равен

$$F_{fi} = \frac{ie\hbar}{mc} A_0 \int e^{-iqr} \nabla \frac{e^{-r/a}}{\sqrt{\pi a^3}} d^3r \approx -\frac{8e\hbar}{mc} \frac{\sqrt{\pi a^3}}{(pa/\hbar)^4} \frac{pA_0}{\hbar}.$$

Преобразуем фазовый объем конечного состояния

$$d^3p = p^2 dp d\Omega = mp dE_f d\Omega,$$

тогда

$$\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) d^3p \rightarrow mp d\Omega.$$

Электрическое поле волны

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t} = \mathcal{E}_0 e^{i(kr - \omega t)} + \mathcal{E}_0^* e^{-i(kr - \omega t)}$$

имеет амплитуду  $\mathcal{E}_0 = i(\omega/c) A_0$ , так что  $|pA_0|^2 = (c/\omega)^2 |p\mathcal{E}_0|^2$ . В итоге вероятность выбивания электрона в элемент телесного угла  $d\Omega$  составляет в единицу времени

$$dw_{fi} = \frac{64}{\pi} \omega_0 \frac{|n\mathcal{E}_0|^2 a^3}{\hbar\omega} \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{7/2} d\Omega, \quad n = \frac{p}{p}, \quad \omega_0 = \frac{Ry}{\hbar}.$$

Чтобы получить дифференциальное сечение фотоэффекта  $d\sigma$ , остается разделить  $dw_{fi}$  на плотность потока фотонов  $j_\Phi$ , связанную с величиной усредненного вектора Пойнтинга  $S$  соотношением  $S = \hbar\omega j_\Phi$ . В свою очередь,

$$S = \frac{c}{4\pi} \overline{|\mathcal{E}(t)|^2} = \frac{c}{2\pi} |\mathcal{E}_0|^2$$

(черта сверху означает усреднение по времени). Таким образом, дифференциальное сечение фотоэффекта равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 64\alpha a^2 \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{7/2} \cos^2 \vartheta,$$

где  $\vartheta$  — угол между направлением вылета электрона  $p$  и вектором электрического поля волны  $\mathcal{E}_0$ . Обращение  $d\sigma$  в нуль при  $\vartheta = \pi/2$  соответствует классической картине электрона, раскачиваемого вдоль направления электрического поля. Полное сечение фотоэффекта быстро падает с ростом частоты:

$$\sigma = \frac{256\pi}{3} \alpha a^2 \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{7/2}.$$

В водородоподобном ионе с зарядом ядра  $Ze$  сечение растет как  $Z^5$ . При этом  $Z^2$  возникает от квадрата матричного элемента, который пропорционален скорости атомного электрона вблизи ядра, еще  $Z^3$  — от вероятности нахождения этого электрона вблизи ядра (ясно, что свободный электрон не может поглотить фотон). Сечение фотоэффекта на нейтральных атомах также растет как  $Z^5$  за счет вклада  $K$ -оболочки.

При прохождении фотонов не слишком больших энергий ( $\hbar\omega \lesssim 1$  МэВ) через вещество, полное сечение их поглощения определяется в основном фотоэффектом.

## ВОПРОСЫ

**42.1.** Найти вероятность ионизации атома водорода под действием электрического поля  $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 e^{-|t|/\tau}$  (рассмотреть случай, когда конечный электрон можно считать свободным). *Указание:* для вероятности перехода удобно использовать формулу

$$dW_{fi} = \frac{1}{\hbar^2 \omega^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial V_{fi}}{\partial t} e^{i\omega t} dt \right|^2 \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3},$$

в которой

$$\frac{\partial V_{fi}}{\partial t} = \frac{e}{m} \mathcal{E}(t) p_{fi}.$$

**42.2.** Встряхивание атома водорода (задача 11.78 ГКК).

**42.4.** Если при расчете фотоэффекта, вместо  $-(e/mc)A\hat{p}$ , использовать в качестве возмущения  $-e\mathcal{E}$ , то в том же приближении ответ для матричного элемента оказывается вдвое больше приведенного выше. Который из ответов правильный? В чем причина расхождения?

## §43. Квантование электромагнитного поля

Используем кулонову калибровку  $\text{div } \mathbf{A}(r, t) = 0$ , в которой в отсутствие источников скалярный потенциал  $\varphi = 0$ , а трехмерно-поперечный векторный потенциал  $\mathbf{A}(r, t)$  удовлетворяет волновому уравнению

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} - \Delta \mathbf{A} = 0.$$

В импульсном представлении, учитывающем в явном виде вещественность векторного потенциала,

$$A(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} [A_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + A_{\mathbf{k}}^*(t) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}] \quad (43.1)$$

амплитуды  $A_{\mathbf{k}}(t)$  удовлетворяют осцилляторному уравнению

$$\ddot{A}_{\mathbf{k}} + \omega_k^2 A_{\mathbf{k}} = 0, \quad \omega_k = c|\mathbf{k}|, \quad (43.2)$$

Итак, в каждой моде, то есть для каждого  $\mathbf{k}$ , имеем гармонический осциллятор, так что

$$A_{\mathbf{k}}(t) \propto e^{-i\omega_k t}, \quad A_{\mathbf{k}}^*(t) \propto e^{i\omega_k t}. \quad (43.3)$$

Разложение по плоским волнам (43.1) позволяет говорить об электромагнитном поле как о бесконечном наборе осцилляторов, частоты которых  $\omega_k$  пробегают непрерывный ряд значений. При квантовании этих осцилляторов возникает квантованное электромагнитное поле. Для придания большей наглядности процедуре квантования, удобно перейти к дискретному набору осцилляторов. Для этого рассмотрим поле в конечном объеме  $\mathcal{V} = L_1 L_2 L_3$  и используем условие периодичности поля на границах объема. При этом компоненты волнового вектора (и частоты) становятся дискретными  $k_i = 2\pi n_i / L_i$ , где  $n_i$  — целые (положительные и отрицательные) числа. В итоге вместо разложения в интеграл Фурье (43.1) возникает разложение в ряд Фурье

$$A(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} [A_{\mathbf{k}}(t) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + A_{\mathbf{k}}^*(t) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}], \quad (43.4)$$

где новые амплитуды  $A_{\mathbf{k}}(t)$  удовлетворяют тем же соотношениям (43.2) — (43.3), что и раньше. Разложение, подобное (43.4), можно написать и для полей  $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$  и  $\mathcal{B}(\mathbf{r}, t)$ , причем амплитуды этих полей в силу уравнений

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

связаны с амплитудами векторного потенциала

$$\mathcal{E}_{\mathbf{k}} = \frac{i\omega_k}{c} A_{\mathbf{k}}, \quad \mathcal{B}_{\mathbf{k}} = i\mathbf{k} \times A_{\mathbf{k}}. \quad (43.5)$$

Из-за условия  $\text{div} A(\mathbf{r}, t) = 0$  или  $\mathbf{k} \cdot A_{\mathbf{k}} = 0$ , вектор  $A_{\mathbf{k}}$  лежит в плоскости, ортогональной волновому вектору  $\mathbf{k}$ , то есть имеет лишь две

независимые компоненты. Две степени свободы осциллятора соответствуют поперечности свободных электромагнитных волн в вакууме. Введем два вектора поляризации  $\epsilon_{k\lambda}$ ,  $\lambda = 1, 2$  (комплексные в базисе циркулярных поляризаций), они удовлетворяют условиям поперечности:  $\mathbf{k} \cdot \epsilon_{k\lambda}$ , ортогональности:  $\epsilon_{k\lambda}^* \cdot \epsilon_{k\lambda'} = \delta_{\lambda\lambda'}$  и полноты:

$$\sum_{\lambda} (\epsilon_{k\lambda})_i (\epsilon_{k\lambda}^*)_j = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \quad (43.6)$$

(здесь  $i, j$  означает компоненты вектора поляризации; справа стоит единичный тензор в плоскости, ортогональной вектору  $\mathbf{k}$ ). Разложим вектор  $A_{\mathbf{k}}(t)$  по векторам поляризации

$$A_{\mathbf{k}}(t) = C_{\mathbf{k}} \sum_{\lambda} a_{k\lambda}(t) \epsilon_{k\lambda}$$

и выберем нормировочный множитель  $C_{\mathbf{k}}$  в виде

$$C_{\mathbf{k}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}} \mathcal{V}}}.$$

Тогда легко показать, что энергия каждой моды колебаний с заданной поляризацией  $\lambda$  равна

$$E_{k\lambda} = \hbar\omega_{\mathbf{k}} a_{k\lambda}^* a_{k\lambda},$$

а импульс моды равен  $(\mathbf{k}/k) E_{k\lambda}/c$ .

Действительно, при использовании разложения

$$A(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}} \mathcal{V}}} \sum_{\lambda} [a_{k\lambda}(t) \epsilon_{k\lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + a_{k\lambda}^*(t) \epsilon_{k\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}] \quad (43.7)$$

выражение для энергии электромагнитного поля

$$E = \int d^3r \frac{\mathcal{E}^2 + \mathcal{B}^2}{8\pi} \quad (43.8)$$

сводится к сумме осцилляторных энергий

$$E = \sum_{k\lambda} E_{k\lambda},$$

а выражение для полного импульса поля

$$\mathbf{P} = \int d^3r \frac{\mathcal{E} \times \mathcal{B}}{4\pi c}$$

сводится к сумме соответствующих импульсов для каждой моды колебаний

$$P = \sum_{k\lambda} \frac{k}{k} \frac{E_{k\lambda}}{c}.$$

Напомним, что для обычного линейного осциллятора гамильтониан

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

в переменных

$$a = \frac{m\omega x + ip}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \quad a^* = \frac{m\omega x - ip}{\sqrt{2m\hbar\omega}}$$

имеет вид  $H = \hbar\omega a^* a$ . При квантовании осциллятора (см. §7) зависящие от времени классические величины  $a(t)$  и  $a^*(t)$  становятся операторами уничтожения  $\hat{a}$  и рождения  $\hat{a}^+$  кванта с энергией  $\hbar\omega$  (при этом сами операторы в обычном шредингеровском представлении не зависят от времени, а временная зависимость определяется волновыми функциями). Классический гамильтониан  $H$  становится оператором Шредингера

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

При использовании перестановочных соотношений  $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$  оператор  $\hat{H}$  приводится к виду

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

где  $\hat{n}$  — оператор числа квантов, собственные значения которого суть целые числа  $n = 0, 1, 2, \dots$

Аналогично, при квантовании электромагнитного поля величины  $a_{k\lambda}^*(t)$  и  $a_{k\lambda}(t)$  становятся операторами рождения  $\hat{a}_{k\lambda}^+$  и уничтожения  $\hat{a}_{k\lambda}$  кванта, соответствующего фотону с энергией  $\hbar\omega_k$ , импульсом  $\hbar k$  и поляризацией  $\lambda$ , а векторный потенциал (43.7) становится не зависящим от времени оператором

$$\hat{A}(\mathbf{r}) = \sum_{k\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k \mathcal{V}}} (\hat{a}_{k\lambda} \boldsymbol{\epsilon}_{k\lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \hat{a}_{k\lambda}^+ \boldsymbol{\epsilon}_{k\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}). \quad (43.9)$$

Поля  $\mathcal{E}(\mathbf{r}, t)$  и  $\mathcal{B}(\mathbf{r}, t)$  также становятся операторами

$$\hat{\mathcal{E}}(\mathbf{r}) = \sum_{k\lambda} \frac{i\omega_k}{c} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k \mathcal{V}}} (\hat{a}_{k\lambda} \boldsymbol{\epsilon}_{k\lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}_{k\lambda}^+ \boldsymbol{\epsilon}_{k\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}), \quad (43.10)$$

$$\hat{B}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k \mathcal{V}}} i\mathbf{k} \times (\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+ \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}),$$

а выражения для энергии (43.8) и импульса электромагнитного поля становятся суммами операторов Шредингера и операторов импульса для отдельных фотонов:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \hat{H}_{\mathbf{k}\lambda}, \quad \hat{H}_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{1}{2} \hbar\omega_k (\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} + \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+),$$

$$\hat{P} = \sum_{\mathbf{k}\lambda} \frac{\mathbf{k}}{k} \frac{\hat{H}_{\mathbf{k}\lambda}}{c}.$$

При использовании перестановочных соотношений

$$[\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}, \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+] = \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$$

оператор  $\hat{H}_{\mathbf{k}\lambda}$  приводится к виду

$$\hat{H}_{\mathbf{k}\lambda} = \hbar\omega_k (\hat{n}_{\mathbf{k}\lambda} + 1/2), \quad \hat{n}_{\mathbf{k}\lambda} = \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}\lambda},$$

где  $\hat{n}_{\mathbf{k}\lambda}$  — оператор числа квантов, собственные значения которого суть целые числа  $n_{\mathbf{k}\lambda} = 0, 1, 2, \dots$

Пусть  $|n_{\mathbf{k}\lambda}, t\rangle$  — состояние поля, содержащее  $n_{\mathbf{k}\lambda}$  фотонов с энергией  $\hbar\omega_k$ , импульсом  $\hbar\mathbf{k}$  и поляризацией  $\lambda$  каждый. Так как

$$\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+ |n_{\mathbf{k}\lambda}, t\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1} |n_{\mathbf{k}\lambda} + 1, t\rangle e^{i\omega_k t},$$

$$\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda} |n_{\mathbf{k}\lambda}, t\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda}} |n_{\mathbf{k}\lambda} - 1, t\rangle e^{-i\omega_k t},$$

то из (43.9) или (43.10) видно, что при действии оператора  $\hat{A}(\mathbf{r})$  или оператора  $\hat{\mathcal{E}}(\mathbf{r})$  на начальное состояние поля может происходить излучение или поглощение одного фотона. Таким образом, матричные элементы оператора  $\hat{A}(\mathbf{r})$  равны:

при излучении фотона

$$\langle n_{\mathbf{k}\lambda} + 1, t | \hat{A}(\mathbf{r}) | n_{\mathbf{k}\lambda}, t \rangle = A_{fi}(\mathbf{r}) e^{i\omega_k t},$$

$$A_{fi}(\mathbf{r}) = \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k \mathcal{V}}} \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}\lambda}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (43.11)$$

при поглощении фотона

$$\langle n_{\mathbf{k}\lambda} - 1, t | \hat{A}(\mathbf{r}) | n_{\mathbf{k}\lambda}, t \rangle = A_{fi}(\mathbf{r}) e^{-i\omega_k t},$$

$$A_{fi}(\mathbf{r}) = \sqrt{n_{k\lambda}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k \mathcal{V}}} \epsilon_{k\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (43.12)$$

Обратим внимание на то, что излучение может происходить и тогда, когда начальное состояние поля не содержит фотонов, то есть при  $n_{k\lambda} = 0$ . Это так называемое *спонтанное излучение*.

Вторичное квантование применимо и к нерелятивистскому уравнению Шредингера. Но там это лишь удобный технический прием, позволяющий автоматически учесть тождественность частиц. Фермионы квантуются с помощью антикоммутирующих операторов. Но вторичное квантование принципиально важно в релятивистских задачах, где частицы реально рождаются и аннигилируют.

### Пример

Линейно поляризованный свет проходит через оптически активную среду, вращающую его плоскость поляризации. Оценим минимальное число квантов, необходимое для регистрации малого угла поворота  $\varphi$  плоскости поляризации.

Угол  $\varphi$  совпадает (с точностью до множителя 1/2) с разностью фаз циркулярных составляющих линейно поляризованной волны, которая возникает при прохождении волны через среду. Эта разность должна быть не меньше неопределенности  $\Delta\varphi$ . Величиной, канонически сопряженной углу  $\varphi$ , является действие, равное  $\hbar N$ , где  $N$  — число квантов. Поэтому неопределенность  $\Delta\varphi$  связана с неопределенностью числа квантов  $\Delta N$  соотношением  $\Delta\varphi \cdot \Delta N \gtrsim 1$ . Учитывая, что  $\Delta N \sim \sqrt{N}$ , получаем

$$N \gtrsim \frac{1}{\varphi^2}.$$

Полученному результату можно придать такую интерпретацию. Пусть волна распространяется вдоль оси  $z$ , а начальная поляризация направлена вдоль оси  $x$ . В этом случае амплитуда электрического поля  $\mathcal{E}_{x0} \propto \sqrt{\hbar\omega N}$ . При повороте плоскости поляризации на малый угол  $\varphi$  появляется  $y$  составляющая электрического поля. Минимальное значение ее амплитуды, соответствующее регистрации одного фотона, равно  $\mathcal{E}_{y0} \propto \sqrt{\hbar\omega}$ . Поэтому оценка для угла поворота такова:  $\varphi \sim \mathcal{E}_{y0}/\mathcal{E}_{x0} \sim 1/\sqrt{N}$ . Отсюда следует та же оценка для  $N$ .

## §44. Испускание и поглощение света

### Спонтанное и вынужденное излучение

Пусть атом из состояния  $\psi_i$  переходит в состояние  $\psi_f$  и излучает фотон с энергией  $\hbar\omega = E_i - E_f$ , импульсом  $\hbar\mathbf{k}$  и поляризацией  $\epsilon_{\mathbf{k}\lambda}$ . Для системы атом+электромагнитное поле это есть переход из начального состояния  $\psi_i |n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle$  в конечное состояние  $\psi_f |n_{\mathbf{k}\lambda} + 1\rangle$  под действием возмущения

$$\hat{V} = -\frac{e}{cm} \hat{A}(\mathbf{r}) \hat{p}, \quad (44.1)$$

где оператор  $\hat{A}(\mathbf{r}) \propto e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$  определен в (43.9). Так как в нашем случае

$$kr \sim \frac{\omega}{c} a_B \sim \frac{v_{\text{ат}}}{c} \ll 1,$$

то зависимость векторного потенциала от  $\mathbf{r}$  можно пренебречь:  $\hat{A}(\mathbf{r}) \approx \hat{A}(0)$ , после чего матричный элемент оператора возмущения  $\hat{V}$  принимает вид

$$V_{fi} e^{i\omega t} = -\frac{e}{cm} A_{fi}(0) p_{fi} e^{i\omega t}, \quad (44.2)$$

где  $A_{fi}$  определен в (43.11). Пусть далее  $\hat{H}$  — гамильтониан атома, тогда

$$p_{fi} = m\dot{x}_{fi} = m\frac{i}{\hbar} \langle \psi_f | \hat{H}\mathbf{r} - \mathbf{r}\hat{H} | \psi_f \rangle = -i\omega r_{fi}, \quad (44.3)$$

что позволяет представить (42.2) как матричный элемент возмущения

$$\hat{V} = -e\mathbf{r} \hat{\mathcal{E}}(0), \quad (44.4)$$

где оператор электрического поля  $\hat{\mathcal{E}}(\mathbf{r})$  определен в (43.10). До сих пор мы рассматривали взаимодействие одного электрона. Обобщение на случай более сложного атома очевидно, достаточно заменить  $e\mathbf{r}$  на дипольный момент системы:

$$e\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{d} = \sum_a e_a \mathbf{r}_a. \quad (44.5)$$

Это так называемое *дипольное приближение*.

Используя (44.2), получим вероятность излучения атомом фотона в телесный угол  $d\Omega$  в единицу времени в виде

$$dw_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{fi}|^2 \delta(\hbar\omega + E_f - E_i) \frac{\mathcal{V} d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{\mathcal{V}\omega^2}{(2\pi\hbar)^2 c^3} |V_{fi}|^2 d\Omega$$

или (после подстановки (43.6) и (44.3), (44.5)) в виде

$$dw_{k\lambda} = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} |d_{fi} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{k\lambda}^*|^2 (n_{k\lambda} + 1) d\Omega \quad (44.6)$$

(при этом вспомогательная величина — объем  $\mathcal{V}$  исчез из конечного результата). В выражении  $n_{k\lambda} + 1$  первое слагаемое, число квантов  $n_{k\lambda}$  в падающей волне, описывает *индуцированное излучение*; второе слагаемое, 1, описывает *спонтанное излучение*, имеющее место и в отсутствие падающей волны. Ясно, что работает лишь поляризация,

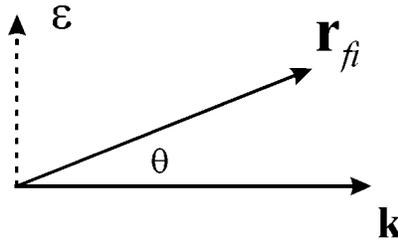


Рис. 15: Векторы, описывающие излучение

лежащая в той же плоскости, что и векторы  $\mathbf{k}$  и  $d_{fi}$  (см. рис. 15).

### Угловое распределение и интенсивность спонтанного дипольного излучения

После суммирования по поляризациям фотона (для этого удобно использовать формулу (43.1)) получим угловое распределение излученных фотонов

$$\frac{dw_{\mathbf{k}}}{d\Omega} = \frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3} \left| d_{fi} \times \frac{\mathbf{k}}{k} \right|^2. \quad (44.7)$$

Если  $d_{fi} \propto (0, 0, 1)$ , то

$$\frac{dw_{\mathbf{k}}}{d\Omega} \propto \sin^2 \theta,$$

где  $\theta$  — полярный угол вылета фотона. Это распределение соответствует классическому излучению заряженной частицей, колеблющейся вдоль оси  $z$ .

Если  $d_{fi} \propto (1, \pm i, 0)$ , то

$$\frac{dw_{\mathbf{k}}}{d\Omega} \propto 1 + \cos^2 \theta,$$

что соответствует классическому излучению заряженной частицей, вращающейся в плоскости  $xy$ .

Интенсивность излучения  $I$  получается умножением полной вероятности излучения на  $\hbar\omega$ :

$$I = \hbar\omega w = \frac{4\omega^4}{3c^3} |d_{fi}|^2. \quad (44.8)$$

Простая полуклассическая оценка такова. Классическая интенсивность дипольного излучения составляет

$$I \sim \frac{e^2}{c^3} \ddot{r}^2 \sim \frac{e^2\omega^4 r^2}{c^3}.$$

Соответственно, число квантов, испущенных в единицу времени, то есть вероятность испускания кванта в единицу времени, равно

$$w = \frac{I}{\hbar\omega} \sim e^2 \frac{\omega^3}{\hbar c^3} r^2 \sim \alpha \frac{\omega^3}{c^2} r^2.$$

Поскольку  $\omega|r_{fi}|/c \sim \alpha$ , то для ширины уровня  $\Gamma = \hbar w_{fi}$  получаем оценку

$$\Gamma \sim \alpha^3 \hbar\omega.$$

Оценка для времени жизни такова

$$\tau = \frac{1}{w} \sim \frac{1}{\alpha^3 \omega}.$$

## Правила отбора

Правила отбора для электрического дипольного, или  $E1$ , перехода определяются матричным элементом  $\langle f|d|i\rangle$ : четность меняется;  $\Delta J = \pm 1, 0$ ; запрещен 0-0 переход; для одноэлектронных конфигураций запрещен по четности переход с  $\Delta l = 0$ .

Правила отбора по  $m$ :  $\mathcal{E}_z$  вызывает переходы с  $\Delta m = 0$ ,  $\mathcal{E}_{x,y}$  или  $\mathcal{E}_{\pm}$  – переходы с  $\Delta m = \pm 1$ .

В следующем порядке по  $v/c$  возникают магнитные дипольные  $M1$  и электрические квадрупольные  $E2$  переходы. Оператор  $M1$  перехода равен (ср. (44.4), (44.5))

$$\hat{V} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \hat{B}(0) = -\frac{e\hbar}{2mc} (\hat{L} + 2\hat{S}) \hat{B}(0).$$

Его амплитуда в  $\mu/(ea_B) \sim \alpha$  раз меньше, чем у  $E1$ . Правила отбора для  $M1$  переходов: не меняются четность и радиальные квантовые

числа;  $\Delta J = \pm 1, 0$ ; 0-0 переход запрещен. В одноэлектронных конфигурациях переход происходит лишь между компонентами тонкой структуры (например,  $p_{1/2} - p_{3/2}$ ).

### Поглощение света

Рассмотрим процесс, обратный излучению, — поглощение света. Пусть атом из состояния  $\psi_f$  переходит в состояние  $\psi_i$  и поглощает фотон с энергией  $\hbar\omega = E_i - E_f$ , импульсом  $\hbar\mathbf{k}$  и поляризацией  $\epsilon_{\mathbf{k}\lambda}$ . Для системы атом+электромагнитное поле это есть переход из начального состояния  $\psi_f | n_{\mathbf{k}\lambda} \rangle$  в конечное состояние  $\psi_i | n_{\mathbf{k}\lambda} - 1 \rangle$  под действием возмущения (44.1). Повторяя далее выкладки, аналогичные случаю излучения, мы получим, что квадрат матричного элемента возмущения  $|V_{fi}|^2$ , а с ним и полная вероятность поглощения света в единицу времени  $w_{f \rightarrow i}^{\text{пог}}$ , отличаются от соответствующих величин для излучения лишь заменой множителя  $n_{\mathbf{k}\lambda} + 1$  на множитель  $n_{\mathbf{k}\lambda}$ . В итоге

$$\frac{w_{f \rightarrow i}^{\text{пог}}}{w_{i \rightarrow f}^{\text{изл}}} = \frac{n_{\mathbf{k}\lambda}}{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1}.$$

## §45. Лэмбовский сдвиг

Нетрудно убедиться в том, что операторы электрического и магнитного полей не коммутируют с операторами чисел заполнения и энергии поля. Поэтому в вакууме электромагнитного поля, то есть в состоянии с наименьшей энергией и нулевыми числами заполнения, поля не равны нулю, а флуктуируют вокруг нуля. Иными словами, для этого состояния средние значения полей  $\mathcal{E}$  и  $\mathcal{B}$  равны нулю, а средние значения квадратов полей отличны от нуля. Нулевое колебание поля с частотой  $\omega$  имеет энергию  $\hbar\omega/2$ , но эта же энергия может быть выражена через фурье-амплитуду  $\mathcal{E}_\omega$  электрического поля

$$\frac{\hbar\omega}{2} = \frac{|\mathcal{E}_\omega|^2}{4\pi} \mathcal{V}, \quad (45.1)$$

где  $\mathcal{V}$  — объем, в котором заключено поле.

Электрон в атоме водорода взаимодействует не только с кулоновым полем ядра, определяемым потенциальной энергией  $U(r) = -e^2/r$ , но и с нулевыми флуктуациями вакуума, что приводит к наблюдаемым эффектам. Пусть  $\rho$  — малая флуктуация координаты

электрона, вызванная вакуумным электрическим полем. Среднее по вакууму от кулонового потенциала равно

$$\langle U(\mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}) \rangle = U(\mathbf{r}) + \langle \boldsymbol{\rho} \rangle \nabla U(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \langle \rho_i \rho_k \rangle \nabla_i \nabla_k U(\mathbf{r});$$

$$\langle \boldsymbol{\rho} \rangle = 0, \quad \langle \rho_i \rho_k \rangle = \frac{1}{3} \delta_{ik} \langle \boldsymbol{\rho}^2 \rangle.$$

Итак, флуктуационная поправка (с учетом того, что  $\Delta U(r) = 4\pi e^2 \delta(r)$ ) составляет

$$\delta U(\mathbf{r}) = \frac{1}{6} \langle \boldsymbol{\rho}^2 \rangle \Delta U(r) = \frac{2\pi}{3} e^2 \delta(\mathbf{r}) \langle \boldsymbol{\rho}^2 \rangle.$$

Из уравнения движения  $m\ddot{\boldsymbol{\rho}} = e\boldsymbol{\mathcal{E}}$  для фурье-компоненты флуктуационного смещения следует:

$$\boldsymbol{\rho}_\omega = -\frac{e}{m\omega^2} \boldsymbol{\mathcal{E}}_\omega.$$

С учетом (45.1) получаем

$$\boldsymbol{\rho}_\omega^2 = \left( \frac{e\boldsymbol{\mathcal{E}}_\omega}{m\omega^2} \right)^2 = 2\pi \frac{e^2 \hbar}{m^2 \omega^2 V}.$$

Для нахождения  $\langle \boldsymbol{\rho}^2 \rangle$  умножим величину квадрата отклонения  $\boldsymbol{\rho}_\omega^2$ , соответствующего одной моде, на число осцилляторов  $\mathcal{V} d^3k / (2\pi)^3$  и просуммируем по всем осцилляторам (при этом из ответа исчезнет объем поля  $\mathcal{V}$ )

$$\langle \boldsymbol{\rho}^2 \rangle = \int \frac{\mathcal{V} d^3k}{(2\pi)^3} \sum_\lambda \boldsymbol{\rho}_\omega^2 = \frac{2\alpha}{\pi} \left( \frac{\hbar}{mc} \right)^2 \int \frac{d\omega}{\omega}.$$

В качестве пределов логарифмического интеграла выбираем  $\omega_{\min} \sim \omega_{\text{ат}}$ , так как ниже электрон нельзя считать свободным, и  $\omega_{\max} \sim mc^2/\hbar$ , так как выше электрон нельзя считать нерелятивистским. В результате, оператор возмущения равен

$$\delta U(\mathbf{r}) = \frac{8}{3} \alpha \ln \frac{1}{\alpha} e^2 \left( \frac{\hbar}{mc} \right)^2 \delta(\mathbf{r}).$$

Поправка к энергии (в этом приближении она возникает лишь для  $s$ -состояния) составляет

$$\delta E_n = \frac{8}{3} \alpha \ln \frac{1}{\alpha} e^2 \left( \frac{\hbar}{mc} \right)^2 |\psi_n(0)|^2 = \frac{16}{3\pi} \alpha^3 \ln \frac{1}{\alpha} \frac{\text{Ry}}{n^3}.$$

Уровень  $2s_{1/2}$  сдвигается вверх на

$$\delta E_2 = \frac{2\alpha^3}{3\pi} \ln \frac{1}{\alpha} \text{Ry}.$$

Таким образом, снимается последнее вырождение в атоме водорода. Вклад аномального магнитного момента электрона,  $\approx (\alpha/2\pi)\mu_B$ , в обсуждаемый сдвиг уровней,  $\sim (\alpha/2\pi)\alpha^2 \sim (\alpha^3/\pi)$ , примерно на порядок меньше. Более точный расчет, проводимый в квантовой электродинамике, дает для смещения уровня  $2s_{1/2}$  величину

$$\delta E_2 = \frac{2\alpha^3}{3\pi} \left( \ln \frac{1}{\alpha} - 1,089 \right) \text{Ry} = 1034 \text{ МГц},$$

а для расщепления уровней  $2s_{1/2}$  и  $2p_{1/2}$  величину  $E_{2s_{1/2}} - E_{2p_{1/2}} = 1057,91 \pm 0,01 \text{ МГц}$  в полном согласии с экспериментальным значением  $1057,90 \pm 0,06 \text{ МГц}$ .

В водородоподобных ионах лэмбовский сдвиг растет как  $Z^4$ . Один множитель  $Z$  возникает от неэкранированного кулонового потенциала ядра и  $Z^3$  — от  $|\psi(0)|^2$ .

## ВОПРОСЫ

**45.1.** а) Излучение при переходе  $2p_m \rightarrow 1s$  для атома водорода. Определить  $dw/d\Omega$ ,  $w$ ,  $\tau$ ,  $\Gamma$ , поляризацию излученного фотона (задача 14.1 ГКК).

б) Как изменится этот ответ при наличии нескольких фотонов с частотой, равной частоте перехода, в начальном состоянии электромагнитного поля?

**45.2.** В начальном состоянии атома  $n \gg 1$ ,  $n - l \ll n$ . Найти приближенные правила отбора по  $n$  и по  $l$  для электромагнитных переходов.

**45.3.** Излучение линейного осциллятора (задача 14.2 ГКК).

**45.4.** Возможные дипольные переходы между уровнями  $n = 3$  и  $n = 2$  ( $\alpha$ -линия серии Бальмера) с учетом их тонкой структуры (по Дираку и по Клейну-Фоку-Гордону).

**45.5.** В начальном состоянии  $ns_{1/2}$  атом поляризован. Как выглядит угловая зависимость вероятности излучения, просуммированной по поляризациям фотона и конечного состояния атома?

**45.6.** Оценки вероятностей переходов между компонентами СТС основного состояния атома водорода (задача 14.9 ГКК).

**45.7.** 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?

**45.8.** Радиационный переворот спина нейтрона в магнитном поле (задача 14.7 ГКК).

**45.7.** Найти угловое распределение фотонов в распадах поляризованных частиц:

$$\begin{aligned} \text{а) } & \omega^0(J^P = 1^-) \rightarrow \pi^0(0^-) + \gamma, \\ \text{б) } & A_1(1^+) \rightarrow \pi(0^-) + \gamma. \end{aligned}$$

**45.8.** Найти с логарифмической точностью (то есть считая  $\ln(1/\alpha) \gg 1$ ) поправку к кулоновому взаимодействию двух частиц, обусловленную флуктуациями вакуума электромагнитного поля. Рассмотреть следующие случаи:

- а) позитроний;
- б) электроны в атоме гелия;
- в) поправка первого порядка по  $m/M$  в атоме водорода.

## §46. Рассеяние света

Это процесс второго порядка: система поглощает (или испускает) фотон, переходя в другое состояние, а затем эта система фотон испускает (или поглощает). Соответственно, сумма этих двух амплитуд упругого рассеяния для дипольных квантов равна по порядку величины

$$\begin{aligned} & \left( \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega}} \cdot \frac{\omega}{c} \right)^2 e^2 \left( \frac{|r_{0n}|^2}{E_0 - E_n + \hbar\omega} + \frac{|r_{0n}|^2}{E_0 - E_n - \hbar\omega} \right) \sim \\ & \sim 2\pi\hbar\omega e^2 a_B^2 \left( \frac{1}{\Delta E + \hbar\omega} + \frac{1}{\Delta E - \hbar\omega} \right). \end{aligned}$$

Энергетическая плотность конечных состояний

$$2 \frac{k^2 dk d\Omega}{(2\pi)^3 d(\hbar\omega)} \sim \frac{\omega^2}{\pi^2 \hbar c^3}.$$

Учет стандартного множителя  $2\pi/\hbar$  и множителя  $c^{-1}$  от потока фотонов дает следующую оценку для сечения рассеяния:

$$\sigma \sim \pi a_{\text{В}}^2 \left( \frac{\omega a_{\text{В}}}{c} \right)^2 \alpha^2 (\hbar\omega)^2 \left( \frac{1}{\Delta E + \hbar\omega} + \frac{1}{\Delta E - \hbar\omega} \right).$$

В случае малых частот  $\hbar\omega \ll \Delta E$  получаем рэлеевское сечение

$$\sigma \sim \pi a_{\text{В}}^2 \alpha^2 \left( \frac{\omega}{\omega_{\text{ат}}} \right)^4.$$

В случае больших частот  $\hbar\omega \gg \Delta E$  получаем томсоновское сечение

$$\sigma \sim \pi a_{\text{В}}^2 \left( \frac{\omega a_{\text{В}}}{c} \right)^2 \alpha^2 (\hbar\omega)^2 \frac{(\hbar\omega_{\text{ат}})^2}{(\hbar\omega)^4} \sim \pi r_e^2,$$

где  $r_e = e^2/(mc^2)$  — классический радиус электрона.

В резонансном случае,  $\hbar\omega = \Delta E = E_n - E_0$ , нужно учесть ширину промежуточного состояния:

$$E_n \rightarrow E_n - \frac{i}{2} \Gamma, \quad \Gamma \sim \alpha^3 \hbar\omega.$$

Тогда

$$\sigma \sim \pi a_{\text{В}}^2 \alpha^4 \left( \frac{\hbar\omega}{\Gamma} \right)^2 \sim \pi \frac{a_{\text{В}}^2}{\alpha^2} \sim \pi \lambda^2.$$

Это характерное резонансное сечение.

## ВОПРОС

**46.1.** Упругое и неупругое рассеяние фотонов сферическим ротатором (задача 14.14 ГКК).

## §47. Молекулы

Малость отношения масс электрона и ядра  $m/M$  обеспечивает применимость адиабатического приближения, рассмотрения движения электронов при фиксированных координатах ядер  $R_i$ . Энергия электронов  $E$  параметрически зависит от  $R_i$ , что позволяет рассматривать  $E(R_i)$  как потенциал для ядер.

Соотношение электронных, колебательных и вращательных частот

$$\omega_{\text{elect}} : \omega_{\text{osc}} : \omega_{\text{rot}} \sim 1 : \sqrt{\frac{m}{M}} : \frac{m}{M}$$

служит количественным оправданием адиабатического приближения. (См.: КМ §78.)

## ВОПРОС

**47.1.** Найти прямым вариационным методом потенциальную кривую  $U(R)$  иона  $H_2^+$ . В качестве пробной функции выбрать

$$\psi_g(r, R) = C_+(R) \left[ \psi \left( r - \frac{1}{2}R \right) + \psi \left( r + \frac{1}{2}R \right) \right],$$

где

$$\psi(r) = \frac{e^{-r/\beta}}{(\pi\beta)^{3/2}},$$

$\beta$  — вариационный параметр и  $\pm R/2$  — координаты ядер.

Рассмотреть также потенциальную кривую  $U(R)$  для пробной функции

$$\psi_u(r, R) = C_-(R) \left[ \psi \left( r - \frac{1}{2}R \right) - \psi \left( r + \frac{1}{2}R \right) \right].$$

## §48. ПРИЛОЖЕНИЕ: о формализме квантовой механики

### Основные положения

Дадим краткий перечень основных положений:

**a)** состоянию физической системы сопоставляется вектор состояния  $|\Psi\rangle$  из гильбертова пространства;

**b)** физической величине сопоставляется линейный эрмитов оператор  $\hat{F}$ ;

**c)** физическая величина  $F$  может принимать только собственные значения  $f$  оператора  $\hat{F}$ ;

**d)** математическое ожидание значений величины  $F$  в состоянии  $\Psi$  определяется диагональным матричным элементом  $\langle \Psi | \hat{F} | \Psi \rangle$ ;

**e)** закон эволюции системы определяется оператором Гамильтона  $\hat{H}$  согласно уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle.$$

## Вектора состояний и волновые функции

Вектор состояния  $|\Psi_f\rangle \equiv |f\rangle$  сопоставляется системе, состояние которой задано классическими параметрами  $f = (f_1, f_2, \dots, f_N)$ , которые можно измерять одновременно.

*Примеры:*

$|\Psi_p\rangle \equiv |p\rangle$  — вектор состояния частицы с определенным импульсом  $p$ ;

$|\Psi_r\rangle \equiv |r\rangle$  — вектор состояния частицы, локализованной в точке  $r$ .

Все возможные векторы состояний образуют линейное пространство, в котором определено скалярное произведение векторов состояний  $|\Psi\rangle$  и  $|\Phi\rangle$ , которое обозначается как  $\langle\Psi|\Phi\rangle = \langle\Phi|\Psi\rangle^*$ , где  $\langle\Psi|$  — вектор, сопряженный  $|\Psi\rangle$ .

В пространстве векторов состояний можно выбрать полный набор независимых ортонормированных векторов  $|f\rangle$  таких, что  $\langle f|f'\rangle = \delta_{ff'}$ . Этот набор образует базис векторного пространства. Выбор базиса неоднозначен. В квантовой механике выбор базиса называется выбором представления.

*Волновые функции.* Любой вектор состояния  $|\Psi\rangle$  задается своими проекциями  $\langle f|\Psi\rangle$  на базис  $|f\rangle$ :

$$|\Psi\rangle = \sum_f |f\rangle \langle f|\Psi\rangle = \sum_f |f\rangle \psi(f).$$

Проекция  $\langle f|\Psi\rangle \equiv \psi(f)$ , рассматриваемая при различных  $f$ , называется волновой функцией данного состояния в  $f$ -представлении.

Если система находится в состоянии  $|\Psi_f\rangle$ , которое является собственным вектором оператора  $\hat{F}$ , то есть

$$\hat{F}|\Psi_f\rangle = f|\Psi_f\rangle,$$

то при измерении величины  $F$  будет получено значение, равное  $f$  с вероятностью единица. Среднее значение  $F$  по произвольному состоянию  $|\Psi\rangle$  равно

$$\langle\Psi|\hat{F}|\Psi\rangle = \sum_{ff'} \langle\Psi|f\rangle \langle f|\hat{F}|f'\rangle \langle f'|\Psi\rangle = \sum_f f |\psi(f)|^2,$$

то есть при измерении величины  $F$  в состоянии  $|\Psi\rangle$  будет получено одно из собственных значений  $f$  оператора  $\hat{F}$  с вероятностью  $|\psi(f)|^2$ . Отсюда видно, что  $|\psi(f)|^2$  — это вероятность найти значение  $f$ . Волновую функцию  $\psi(f)$  называют также амплитудой вероятности.

## Преобразование волновой функции к другому представлению

$$\psi(g) = \sum_f \langle g|f \rangle \psi(f),$$

где волновая функция  $\langle g|f \rangle = \psi_f(g) = \psi_g^*(f)$  определяет связь двух базисов <sup>2</sup>.

*Пример:* волновая функция частицы с определенным импульсом в координатном представлении

$$\langle r|p \rangle = \psi_p(r) = \frac{e^{ipr/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}}.$$

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

$$\psi(p) = \langle p|\Psi \rangle = \sum_r \langle p|r \rangle \langle r|\Psi \rangle = \int \frac{e^{-ipr/\hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \psi(r) d^3r;$$

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

## Операторы. Связь представлений

Если определенно преобразование, переводящее вектор состояния  $|\Psi \rangle$  в вектор состояния  $|\Phi \rangle$ , то говорят, что задан оператор  $\hat{G}$  этого преобразования  $|\Phi \rangle = \hat{G}|\Psi \rangle$ .

*Матрица оператора.* Действие оператора  $\hat{G}$  на базисный вектор состояния  $|f \rangle$  задается матрицей  $G_{f'f} = \langle f'|\hat{G}|f \rangle$ :

$$\hat{G}|f \rangle = \sum_{f'} |f' \rangle \langle f'|\hat{G}|f \rangle = \sum_{f'} |f' \rangle G_{f'f}.$$

Для произвольного вектора состояния

$$\hat{G}|\Psi \rangle = \sum_f |f \rangle \langle f|\hat{G}|\Psi \rangle = \sum_{ff'} |f \rangle \langle f|\hat{G}|f' \rangle \langle f'|\Psi \rangle = \sum_{ff'} |f \rangle G_{ff'} \psi(f').$$

Таким образом, оператор

$$\hat{G} = \sum_{ff'} |f \rangle G_{ff'} \langle f'|$$

---

<sup>2</sup>Если величина  $f$  принимает непрерывный ряд значений, то символ  $\delta_{ff'}$  следует заменить на  $\delta$ -функцию  $\delta(f - f')$ , а сумму на интеграл  $\sum_f \dots \rightarrow \int \dots df$ .

полностью определен, если известна его матрица  $G_{ff'}$ . Действие оператора на волновую функцию получим, проецируя соотношение  $|\Phi\rangle = \hat{G}|\Psi\rangle$  на  $F$ -базис:

$$\varphi(f) = \langle f|\Phi\rangle = \sum_{f'} G_{ff'}\psi(f'); \quad \psi(f') = \langle f'|\Psi\rangle.$$

Связь операторов в различных представлениях:

$$G_{ff'} = \langle f|\hat{G}|f'\rangle = \sum_{gg'} \langle f|g\rangle \langle g|\hat{G}|g'\rangle \langle g'|f'\rangle.$$

*Пример:* матрица оператора импульса в  $p$ -представлении имеет вид

$$\langle p'|\hat{p}|p\rangle = p \delta(p - p');$$

в координатном представлении

$$\langle r'|\hat{p}|r\rangle = \int d^3p d^3p' \psi_{r'}^*(p') p \delta(p - p') \psi_r(p) = +i\hbar \frac{\partial}{\partial r} \delta(r - r').$$

Его действие на волновую функцию  $\psi(r)$  сводится к дифференцированию

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

Аналогично

$$\langle r'|\hat{r}|r\rangle = r \delta(r' - r); \quad \langle p'|\hat{r}|p\rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial p} \delta(p' - p);$$

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

На этих примерах видно, что матрицы операторов  $\hat{r}$  и  $\hat{p}$  (и построенные из них) пропорциональны  $\delta$ -функции или ее производной:

$$G_{ff'} = \hat{G}_S(f) \delta(f' - f).$$

Их действие на волновую функцию сводится к действию на волновую функцию оператора  $\hat{G}_S(f)$ :

$$\sum_{f'} G_{ff'} \psi(f') = \hat{G}_S(f) \psi(f).$$

Оператор  $\hat{G}_S(f)$  называют *шредингеровским оператором* в  $f$ -представлении (в отличие от матричного  $G_{ff'}$ ). В частности, в  $r$ -представлении

$$\hat{r}_S = r, \quad \hat{p}_S = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r};$$

в  $p$ -представлении

$$\hat{r}_S = +i\hbar \frac{\partial}{\partial p}, \quad \hat{p}_S = p.$$

Сербо Валерий Георгиевич, Хриплович Иосиф Бенционович

КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

---

Подписано в печать

Печать офсетная

Тираж      экз.

Заказ

Формат 60x80/16

Уч.-изд.л.

Цена

---

Издательский центр Новосибирского университета,  
630090, Новосибирск – 90. Пирогова, 2.