

А. И. Мильштейн, А. В. Резниченко



# Лекции по квантовой механике

$$(\hat{p} - mc)\psi = 0$$

Новосибирск  
2021

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
Физический факультет

А. И. Мильштейн, А. В. Резниченко

## ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Учебное пособие

Новосибирск  
2021

УДК 530.145  
ББК В318  
М60

Рецензент  
член-корр. РАН, профессор *В. С. Фадин*

**Мильштейн, А. И.**

**М60** Лекции по квантовой механике: учеб. пособие / А. И. Мильштейн, А. В. Резниченко ;  
Новосиб. гос. ун-т. – Новосибирск : ИПЦ НГУ, 2021. – 196 с.

ISBN 978-5-4437-1227-7

Предлагаемое учебное пособие составлено на основе конспекта лекций годового курса квантовой механики, который читался в Новосибирском государственном университете для студентов, специализирующихся в области физики элементарных частиц и ускорительной физики. Пособие будет также полезно всем студентам, заинтересованным в углублённом изучении квантовой механики. В данном курсе обсуждается целый ряд вопросов, которые обычно не включаются в стандартные программы изучения квантовой механики, но которые важны для правильного понимания физики.

**УДК 530.145**  
**ББК В318**

*Рекомендовано к печати кафедрой теоретической физики ФФ НГУ  
(протокол от 04.07.2021 г.)*

ISBN 978-5-4437-1227-7

© Новосибирский государственный  
университет, 2021  
© А. И. Мильштейн, А. В. Резниченко, 2021

## **Аннотация**

Предлагаемое учебное пособие составлено на основе конспекта лекций годового курса квантовой механики, который читался в Новосибирском государственном университете для студентов, специализирующихся в области физики элементарных частиц и ускорительной физики. Пособие будет также полезно всем студентам, заинтересованным в углублённом изучении квантовой механики. В данном курсе обсуждается целый ряд вопросов, которые обычно не включаются в стандартные программы изучения квантовой механики, но которые важны для правильного понимания физики.

# Содержание

<b>Предисловие</b>	<b>7</b>
<b>Раздел 1. Переход от классической механики к квантовой</b>	<b>8</b>
<b>Раздел 2. Волновое уравнение Шредингера и его свойства</b>	<b>13</b>
2.1. Свойства уравнения Шредингера . . . . .	14
2.2. Эвристический подход к соотношению неопределённостей . . . . .	16
<b>Раздел 3. Операторы в квантовой механике</b>	<b>19</b>
3.1. Коммутаторы операторов, теорема о вириале, соотношение полноты . . . . .	20
3.2. Соотношение неопределённостей . . . . .	23
3.3. Одновременная измеримость величин . . . . .	24
<b>Раздел 4. Состояния с определённой энергией</b>	<b>26</b>
4.1. Состояния с определённой энергией в одномерном случае . . . . .	26
4.2. Осцилляционная теорема . . . . .	27
4.3. Дискретный спектр локализованных состояний . . . . .	28
4.4. Операторный подход к решению уравнения Шредингера в осцилляторном потенциале . . . . .	32
4.5. Когерентные состояния . . . . .	33
<b>Раздел 5. Гейзенберговское представление</b>	<b>35</b>
<b>Раздел 6. Непрерывный спектр, одномерное рассеяние</b>	<b>37</b>
<b>Раздел 7. Квазистационарные состояния</b>	<b>43</b>
<b>Раздел 8. Периодический потенциал. Оператор сдвига. Теорема     Блоха</b>	<b>47</b>
<b>Раздел 9. Преобразование Галилея для уравнения Шредингера</b>	<b>50</b>
<b>Раздел 10. Уравнение Шредингера в электромагнитном поле</b>	<b>51</b>
10.1. Классическая механика в электромагнитном поле . . . . .	51
10.2. Квантовая механика в электромагнитном поле . . . . .	53
10.3. Движение заряженной частицы в однородном магнитном поле, уровни Ландау . . . . .	54
<b>Раздел 11. Орбитальный момент</b>	<b>56</b>
11.1. Построение сферических функций . . . . .	61
11.2. Тензорное представление группы вращений . . . . .	63

<b>Раздел 12. Спин</b>	<b>67</b>
12.1. Уравнение Паули . . . . .	71
12.2. Движение спина в магнитном поле . . . . .	72
<b>Раздел 13. Сложение моментов</b>	<b>74</b>
13.1. Векторная теорема . . . . .	78
13.2. Правила отбора для тензорных операторов . . . . .	81
13.3. Система двух частиц . . . . .	81
13.4. Каноническое квантование . . . . .	82
<b>Раздел 14. Квантовая механика и интегралы по траекториям</b>	<b>84</b>
<b>Раздел 15. Центральное-симметричное поле</b>	<b>86</b>
15.1. Радиальное уравнение Шредингера . . . . .	86
15.2. Двухмерный случай уравнения Шредингера . . . . .	88
15.3. Свободное движение . . . . .	89
15.4. Сферическая прямоугольная яма . . . . .	90
15.5. Двухмерная мелкая яма . . . . .	91
15.6. Трёхмерный гармонический осциллятор: $U(r) = m\omega^2 r^2/2$ . . . . .	92
15.7. Кулоновский потенциал . . . . .	93
15.8. Матричные элементы операторов в кулоновском поле . . . . .	94
15.9. Потенциал $U(r) = -e^2/r - g/r^2$ . . . . .	96
15.10. Электромагнитные поля в атоме . . . . .	96
<b>Раздел 16. Квазиклассическое приближение</b>	<b>99</b>
16.1. Квазиклассическая волновая функция и условие применимости	99
16.2. Квантование Бора — Зоммерфельда . . . . .	100
16.3. Нормировка квазиклассической волновой функции локализованного состояния . . . . .	103
16.4. Правило квантования Бора — Зоммерфельда в центрально-симметричном поле . . . . .	104
16.5. Подбарьерное прохождение . . . . .	105
16.6. Двойная яма . . . . .	107
<b>Раздел 17. Релятивистская квантовая механика</b>	<b>109</b>
17.1. Уравнение Клейна — Гордона . . . . .	109
17.2. Уравнение Дирака . . . . .	111
17.3. Свободное движение дираковской частицы . . . . .	113
17.4. Гамильтонова форма уравнения Дирака . . . . .	114
17.5. Свойства матриц Дирака . . . . .	114
17.6. Преобразование пространственной инверсии $\hat{P}$ . . . . .	115
17.7. Преобразование обращения времени $\hat{T}$ . . . . .	115
17.8. Преобразование зарядового сопряжения $\hat{C}$ . . . . .	116

17.9. Преобразование Лоренца и уравнение Дирака . . . . .	117
17.10. Уравнение Паули . . . . .	119
17.11. Обобщённое уравнение Дирака . . . . .	120
17.12. Сохранение полного момента в центральном-симметричном поле . . . . .	121
17.13. Тонкая структура атома водорода . . . . .	123
17.14. Интерпретация различных вкладов в тонкую структуру . . . . .	124
17.15. Релятивистские поправки к спектру в кулоновском поле . . . . .	126
17.16. Спиральность . . . . .	129
17.17. Парадокс Клейна . . . . .	129
<b>Раздел 18. Трёхмерное рассеяние нерелятивистских частиц</b>	<b>131</b>
18.1. Амплитуда рассеяния и сечение рассеяния . . . . .	131
18.2. Борновское приближение . . . . .	132
18.3. Эйкональное приближение . . . . .	134
18.4. Оптическая теорема . . . . .	134
18.5. Борновское приближение для рассеяния релятивистских частиц в потенциале. Рассеяние быстрого элек- трона в кулоновском поле . . . . .	136
<b>Раздел 19. Рассеяние в сферически-симметричном потенциале</b>	<b>138</b>
19.1. Фазовая теория рассеяния . . . . .	138
19.2. Рассеяние медленных частиц . . . . .	140
19.3. Резонансное рассеяние . . . . .	141
19.4. Неупругое рассеяние . . . . .	142
<b>Раздел 20. Тождественность частиц в квантовой механике</b>	<b>144</b>
<b>Раздел 21. Приближённые методы в квантовой механике</b>	<b>146</b>
21.1. Стационарная теория возмущений . . . . .	146
21.2. Силы Ван-дер-Ваальса . . . . .	147
21.3. Приближение Томаса — Ферми . . . . .	148
21.4. Вариационный метод . . . . .	149
<b>Раздел 22. Спектры атома водорода и многоэлектронных     атомов</b>	<b>152</b>
<b>Раздел 23. Сверхтонкая структура</b>	<b>157</b>
<b>Раздел 24. Изотопический сдвиг</b>	<b>160</b>
<b>Раздел 25. Атом в электрическом поле (эффект Штарка)</b>	<b>162</b>

<b>Раздел 26. Атом в магнитном поле</b>	<b>164</b>
<b>Раздел 27. Нестационарная теория возмущений</b>	<b>166</b>
27.1. Случай возмущения $\hat{V}(x, t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \pm\infty$ . . . . .	166
27.2. Случай возмущения $\hat{V}(x, t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow -\infty$ и $\hat{V}(x, t) \rightarrow U(x) \neq 0$ при $t \rightarrow \infty$ . . . . .	167
27.3. Случай возмущения, которое включается мгновенно, но не является слабым . . . . .	168
27.4. Адиабатические переходы . . . . .	169
27.5. Периодическое возмущение . . . . .	170
27.6. Фотоэффект . . . . .	171
27.7. Правило Ферми и сечение рассеяния в борновском приближении	172
27.8. Квантование электромагнитного поля . . . . .	174
<b>Раздел 28. Излучение электромагнитных волн</b>	<b>177</b>
28.1. Электрическое дипольное излучение . . . . .	177
28.2. Магнитно-дипольный и электрический квадрупольный переходы . . . . .	179
28.3. Индуцированное излучение . . . . .	180
28.4. Лэмбовский сдвиг . . . . .	181
<b>Раздел 29. Двухфотонные процессы</b>	<b>184</b>
29.1. Рассеяние света . . . . .	184
29.2. Излучение двух фотонов . . . . .	188
29.3. Спиновая поправка к сечению томсоновского рассеяния . . . . .	189
<b>Раздел 30. Показатель преломления</b>	<b>193</b>
<b>Раздел 31. Вращательные и колебательные спектры молекул</b>	<b>194</b>



## ПРЕДИСЛОВИЕ

В отличие от монографий, посвящённых изложению основ квантовой механики, конспекты лекций имеют сильные ограничения в объёме, связанные с учебными планами. Поэтому подробность изложения тех или иных вопросов в сильной степени отражает предпочтения и стиль авторов. Предлагаемый годовой курс лекций читался студентам Новосибирского государственного университета, специализирующимся в физике элементарных частиц и ускорителей. Поэтому заметное место в данном учебном пособии уделено релятивистской физике и приближённым методам вычислений. Кроме того, обсуждается целый ряд вопросов, которые не входят в стандартные программы квантовой механики, но являются важными для понимания физики квантовых явлений. Некоторые промежуточные вычисления, которые необходимо выполнить при выводе тех или иных формул, предлагаются студентам в виде задач. Программа учебного пособия составлена так, чтобы сделать доступным для студентов содержание специальных курсов, которые читаются параллельно на соответствующих кафедрах. Обсуждение вопросов, которые не вошли в наши лекции, можно найти в учебниках [1—9]. Содержание учебного пособия направлено на то, чтобы максимально облегчить студентам самостоятельное выполнение заданий, а также решение задач, предлагаемых на семинарских занятиях. В этой связи студентам будут полезны задачки [10—12].

С математическими методами, необходимыми для решения задач, можно ознакомиться в задачнике [13]. Вся указанная выше литература приведена в конце конспекта.

Мы уверены, что предлагаемое учебное пособие будет полезно студентам всех специальностей, для которых требуется углублённое знание квантовой механики.

## РАЗДЕЛ 1. ПЕРЕХОД ОТ КЛАССИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ К КВАНТОВОЙ

Перечислим проблемы, которые не могли быть решены в рамках классической механики и классической электродинамики.

1. Объяснить спектр излучения «чёрного тела» и положение максимума.
2. Почему кинетическая энергия электронов, вылетевших из металла под воздействием света (фотоэффект), зависит от частоты света и не зависит от его интенсивности, почему существует порог частоты, при котором электроны вылетают из металла.
3. Чем определяется характерный размер атомов.
4. Почему наблюдается дискретный спектр в излучении атомов.
5. Почему электроны не падают на ядро из-за излучения.

«Новая физика» возникает тогда, когда появляется параметр, определяющий границы применимости «старой физики». В специальной теории относительности таким параметром является скорость света  $c = 3 \cdot 10^{10}$  см/с, а в квантовой механике — постоянная Планка  $\hbar = 1,054 \cdot 10^{-27}$  эрг·с. Постоянная Планка имеет размерность действия (энергия · время) или момента импульса (импульс · расстояние). Если характерные величины действия или момента импульса порядка  $\hbar$ , то начинают работать квантовые законы, а если много больше  $\hbar$ , то работают законы классической механики.

1. Макс Планк в 1900 г. сделал предположение о том, что электромагнитное излучение испускается в виде отдельных порций энергии (квантов), величина которых  $\varepsilon$  связана с частотой излучения  $\omega$  соотношением  $\varepsilon = \hbar\omega$ . При этом  $\omega_{\max} = 2,82 kT/\hbar$ , здесь  $k = 1,38 \cdot 10^{-16}$  эрг/К — постоянная Больцмана,  $T$  — температура.
2. Фотоэффект был объяснён в 1905 г. Альбертом Эйнштейном. Планк предполагал, что свет излучается только квантованными порциями, а Эйнштейн считал, что свет существует только в виде квантованных порций. Из закона сохранения энергии следует формула Эйнштейна для фотоэффекта:

$$\hbar\omega = I + \frac{mv^2}{2},$$

где  $I$  — работа выхода (минимальная энергия, необходимая для вылета электрона из вещества),  $mv^2/2$  — кинетическая энергия вылетающего электрона,  $\omega$  — частота падающего фотона с энергией  $\hbar\omega$ . Порог определяется условием  $\hbar\omega_{\min} = I$ .

3. В 1912 г. Резерфорд и его сотрудники поставили опыт по рассеянию альфа-частиц в веществе. Резерфорд пришёл к выводу, что весь положительный заряд сосредоточен в центре атома в тяжёлом ядре радиуса  $\sim 10^{-13}$  см, а отрицательно-заряженные частицы (электроны) обращаются вокруг этого ядра в области радиуса  $\sim 10^{-8}$  см.
4. Электроны с ядрами атомов и между собой взаимодействуют по закону Кулона,  $U(r) \sim e^2/r$ , где  $e$  — заряд электрона, а  $r$  — расстояние между частицами. В первом приближении массу ядра  $M = A \cdot 1,7 \cdot 10^{-24}$  г, где  $A$  — суммарное число протонов и нейтронов в ядре, можно считать бесконечно большой по сравнению с массой электрона  $m_e = 0,9 \cdot 10^{-27}$  г. Из массы электрона и заряда электрона нельзя построить величину, имеющую размерность длины. Поэтому в нерелятивистской классической электродинамике нет характерной длины. В релятивистской классической электродинамике, где в качестве параметра возникает скорость света  $c$ , можно построить классический радиус электрона

$$r_e = \frac{e^2}{m_e c^2} = 2,8 \cdot 10^{-13} \text{ см},$$

но это слишком маленькая величина, много меньше характерного размера атома  $\sim 10^{-8}$  см. Из  $\hbar$ ,  $e$  и  $m_e$  можно построить величину

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

называемую боровским радиусом. В релятивистской квантовой механике существует ещё величина

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

называемая комptonовской длиной волны электрона — расстояние, на котором становятся существенными релятивистские эффекты. Из  $e$ ,  $\hbar$  и  $c$  можно построить безразмерную величину

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = 1/137 \ll 1,$$

называемую постоянной тонкой структуры и играющую важную роль в атомной физике и квантовой электродинамике. Таким образом, имеем иерархию длин:

$$r_e = \alpha \lambda_C = \alpha^2 a_B.$$

Из  $\hbar$ ,  $e$  и  $m_e$  можно построить величину

$$E_{at} = \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = 27,2 \text{ эВ},$$

имеющую размерность энергии. Величина  $E_{at}/2 = 13,6$  эВ обозначается  $Ry$  и называется Ридбергом. Напомним, что

$$1 \text{ эВ} = 1,6 \cdot 10^{-12} \text{ эрг},$$

а заряд электрона в системе СГС равен  $e = 4,8 \cdot 10^{-10}$ .

5. Полуклассическая теория Бора (1913 г.). Электрон может двигаться только по определённым орбитам, излучение и поглощение энергии электроном происходит при скачкообразном переходе с одной орбиты на другую. Рассмотрим простейший случай движения по круговым орбитам. Имеем два уравнения (равенство центробежной и кулоновской силы и условие квантования момента импульса):

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{e^2}{r^2}, \quad mvr = n\hbar, \quad n = 1, 2, \dots$$

Отсюда находим  $r = n^2 a_B$ ,  $v = e^2/(\hbar n)$  и

$$E_n = \frac{mv^2}{2} - \frac{e^2}{r} = -\frac{Ry}{n^2}, \quad \hbar\omega_{nk} = E_n - E_k = \left( \frac{1}{k^2} - \frac{1}{n^2} \right) Ry.$$

Полное согласие с экспериментом для атома водорода! Для отношения скорости электрона в атоме к скорости света имеем  $v/c \sim \alpha = 1/137$ . Для водородоподобного атома с зарядом ядра  $Q = Z|e|$  имеем  $v/c \sim Z\alpha$ , и для тяжёлых атомов этот параметр может быть не мал, т. е. надо учитывать релятивистские поправки.

Существует состояние с наименьшей энергией (основное состояние), отвечающее  $n = 1$ , т. е. энергия основного состояния равна  $(-Ry)$ . Если частица находится в основном состоянии, то она не может излучать, так как нет состояний с более низкой энергией. Бор понимал, что его модель не является настоящей теорией.

**Задача 1.1.** Покажите, что в классической электродинамике электрон, движущийся по круговой орбите на расстоянии  $R$ , упал бы на ядро за счёт излучения за время  $t \sim (r_e/c)(R/r_e)^3 \sim 6 \cdot 10^{-11}$  с.

6. Напомним некоторые свойства волнового движения (пока неважно, какой природы). Рассмотрим некоторую плоскую волну с волновым вектором  $k$  и частотой  $\omega(k)$ ,

$$\psi_k(x, t) = \exp[-i\omega(k)t + ikx].$$

Построим из таких волн волновой пакет

$$\Psi(x, t) = \int \frac{dk}{2\pi} f(k) \psi_k(x, t),$$

где  $f(k)$  — некоторая плавная функция, имеющая максимум при  $k = k_0$ , так что приближённо имеем  $\omega(k) = \omega(k_0) + (k - k_0) \frac{\partial \omega(k_0)}{\partial k_0}$ , где  $k = k_0 + (k - k_0)$  и в результате

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &\approx f(k_0) \psi_{k_0}(x, t) \int \frac{dk}{2\pi} \exp[i(k - k_0)(x - v_0 t)] = \\ &= f(k_0) \psi_{k_0}(x, t) \delta(x - v_0 t), \quad v_0 = \frac{\partial \omega(k_0)}{\partial k_0}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь  $v_0$  — групповая скорость волнового пакета ( $v_1 = \omega(k_0)/k_0$  называется фазовой скоростью). Видно, что центр пакета движется со скоростью  $v_0$ , и именно с групповой скоростью передаётся информация, поэтому  $v_0 \leq c$ , а  $v_1 = \omega(k_0)/k_0$  может быть любой.

Перечислим некоторые свойства  $\delta$ -функции, которые нам будут необходимы ниже:

$$\begin{aligned} \int dy \exp(iay) &= 2\pi \delta(a), \quad \int dy f(y) \delta(y - a) = f(a), \quad \delta(ay) = \frac{1}{|a|} \delta(y), \\ \delta(f(y)) &= \sum_n \frac{1}{|f'(y_n)|} \delta(y - y_n), \quad \text{где } f(y_n) = 0, \quad f'(y_n) \neq 0. \end{aligned}$$

Из специальной теории относительности следует, что для частиц, движущихся со скоростью света, энергия и импульс связаны соотношением  $\varepsilon = cp$ . Поэтому у кванта света (фотона)  $\varepsilon = \hbar\omega$ ,  $\varepsilon = cp$ ,  $\omega = ck$ , следовательно  $p = \hbar k$ . В 1924 г. де Бройль высказал гипотезу о том, что массивной частице тоже можно сопоставить волну с частотой  $\omega = E/\hbar$  и волновым вектором  $k = p/\hbar$ . Второе соотношение можно вывести из первого, если предположить, что частица движется с групповой скоростью волны. Действительно,

$$v = \frac{\partial}{\partial k} \left( \frac{mv^2}{2\hbar} \right) = v \frac{\partial}{\partial k} \left( \frac{mv}{\hbar} \right),$$

или  $mv = p = \hbar k$ . Смысл этой волны стал понятен только после появления последовательной квантовой теории. Первые эксперименты, подтвердившие волновую природу частиц, были выполнены К. Дэвиссоном и Л. Джермером, а также независимо Дж. П. Томсоном в 1927 г. В этих работах использовалась дифракция электронов на кристаллической решётке. Полученные результаты полностью аналогичны результатам по дифракции света на кристаллической решётке.

7. В классической электродинамике при рассеянии электромагнитной волны с частотой  $\omega$  на покоящемся электроне частота рассеянного света не меняется,  $\omega' = \omega$ . В квантовой теории это не так (эффект, открытый Артуром Комптоном в 1923 г. в экспериментах с рентгеновским излучением).

В релятивистской теории связь энергии с импульсом определяется соотношением  $\varepsilon = c|\mathbf{p}|$  для частицы с нулевой массой, и  $\varepsilon = \sqrt{\mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$  для частицы с ненулевой массой. Поэтому 4-х импульсы начального и конечного фотонов равны  $p = (\hbar\omega/c)(1, \mathbf{n})$  и  $p' = (\hbar\omega'/c)(1, \mathbf{n}')$ , где  $\mathbf{n}$  и  $\mathbf{n}'$  — единичные векторы вдоль направления распространения начального и конечного фотонов. Для 4-х импульсов начального покоящегося электрона и конечного движущегося электрона имеем  $P = (m_e c, \mathbf{0})$  и  $P' = (E'/c, \mathbf{P}')$ . При этом  $p^2 = p'^2 = 0$  и  $P^2 = P'^2 = m_e^2 c^2$ . Запишем закон сохранения энергии-импульса в виде  $P' = P + p - p'$  и возведём левую и правую часть этого равенства в квадрат, используя формулу  $A \cdot B = A^0 B^0 - \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ . В результате получаем

$$\omega' = \frac{\omega}{1 + \frac{\hbar\omega}{m_e c^2}(1 - \mathbf{n} \cdot \mathbf{n}')}.$$

Если  $\hbar\omega \ll m_e c^2$ , то  $\omega - \omega' \ll \omega$ . В пределе  $\hbar \rightarrow 0$  имеем  $\omega' = \omega$ .

**Задача 1.2.** Релятивистский электрон с энергией  $\varepsilon \gg m_e c^2$  и фотон с частотой  $\omega$  движутся навстречу друг другу. Показать, что при рассеянии фотона назад ( $\mathbf{n}' = -\mathbf{n}$ ) частота конечного фотона равна

$$\omega' = \frac{4\gamma^2 \omega}{1 + \frac{4\gamma \hbar \omega}{m_e c^2}},$$

где  $\gamma = \varepsilon/(m_e c^2)$  — релятивистский фактор электрона. При  $\hbar = 0$  получим  $\omega' = 4\gamma^2 \omega$ . Подчеркнём, что этот эффект классический и является следствием эффекта Доплера (объясните), т. е. не имеет отношение к эффекту Комптона.

## РАЗДЕЛ 2. ВОЛНОВОЕ УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА И ЕГО СВОЙСТВА

Согласно гипотезе де Бройля, свободной частице с массой  $m$  и скоростью  $\mathbf{v}$  можно сопоставить волновую функцию

$$\Psi_{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ -\frac{mv^2}{2}t + m\mathbf{v} \cdot \mathbf{r} \right] \right\}. \quad (2)$$

Здесь  $\Psi_{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t)$  является собственной функцией оператора  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \partial/\partial \mathbf{r}$ ,

$$\hat{\mathbf{p}} \Psi_{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) = m\mathbf{v} \Psi_{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p} \Psi_{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t),$$

с собственным значением  $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$ . Поэтому оператор  $\hat{\mathbf{p}}$  называется оператором импульса. Кроме того,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) = \frac{mv^2}{2} \Psi_{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) = \frac{p^2}{2m} \Psi_{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t).$$

Следовательно, волновая функция де Бройля удовлетворяет уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \Psi_{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t).$$

Оператор  $\hat{\mathbf{p}}^2/(2m)$  совпадает с гамильтонианом свободной частицы, в котором импульс заменили на оператор импульса. Пусть теперь частица движется в потенциале  $U(\mathbf{r})$  и описывается волновой функцией  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ . Шредингер постулировал (1926 г.), что волновая функция частицы удовлетворяет уравнению (называемому сегодня уравнением Шредингера)

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t), \\ \hat{H} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + U(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3)$$

Оператор  $\hat{H}$  называется оператором Гамильтона. Он получается из классического гамильтониана заменой классических координат и импульсов на соответствующие операторы.

Займёмся теперь выяснением физического смысла волновой функции. Для этого умножим левую и правую части уравнения Шредингера на  $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ , возьмём комплексное сопряжение от получившегося уравнения и вычтем из первого уравнения второе, в результате получаем

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 &= -\frac{\hbar^2}{2m} [\Psi^*(\mathbf{r}, t) \Delta \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \Delta \Psi^*(\mathbf{r}, t)] = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \operatorname{div} [\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t)]. \end{aligned} \quad (4)$$

Это уравнение можно переписать в виде уравнения непрерывности

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= 0, \\ \rho(\mathbf{r}, t) &= |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \\ \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi(\mathbf{r}, t) - \Psi(\mathbf{r}, t) \nabla \Psi^*(\mathbf{r}, t)].\end{aligned}\tag{5}$$

Из уравнения непрерывности следует, что если интеграл  $\int d^3r \rho(\mathbf{r}, t)$  является конечным, то

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d^3r \rho(\mathbf{r}, t) = 0.$$

Таким образом, интеграл не зависит от времени! Поскольку величина  $\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 > 0$ , то можно считать, что  $\rho(\mathbf{r}, t)$  является плотностью вероятности найти частицу в момент времени  $t$  в элементе объёма  $d^3r$ ,

$$dW(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r,$$

и нормировать волновую функцию условием

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

которое отвечает тому, что вероятность найти частицу во всём объёме равна единице. Вероятностная интерпретация волновой функции не была очевидной и вызывала жаркие дискуссии у создателей квантовой механики. Представим волновую функцию в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} \exp[iS(\mathbf{r}, t)],$$

где  $S(\mathbf{r}, t)$  — вещественная функция. Тогда для тока находим

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \nabla S(\mathbf{r}, t).\tag{6}$$

Таким образом, ток отличен от нуля только для комплексной волновой функции. Заметим, что для волны де Бройля  $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$  совпадает со скоростью частицы  $\mathbf{p}/m$ .

## 2.1. Свойства уравнения Шредингера

1. Уравнение Шредингера (3) является линейным, поэтому сумма решений уравнения тоже является решением.
2. Уравнение Шредингера содержит только первую производную по времени. Поэтому знание волновой функции в какой-то момент времени  $t_0$  определяет её во все моменты времени.



3. Волновая функция является непрерывной во всех точках.
4. Если потенциал  $U(\mathbf{r})$  является ограниченным, то градиент волновой функции тоже является непрерывным во всех точках. Этот факт доказывается интегрированием по  $x$  левой и правой части уравнения Шредингера по бесконечно малому интервалу вокруг произвольной точки  $x_0$ .

Рассмотрим теперь преобразование Фурье  $\Phi(\mathbf{p}, t)$  волновой функции  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ :

$$\Phi(\mathbf{p}, t) = \int d^3r \Psi(\mathbf{r}, t) \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar).$$

Из свойств преобразования Фурье следует, что

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} |\Phi(\mathbf{p}, t)|^2 = \int d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1. \quad (7)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} |\Phi(\mathbf{p}, t)|^2 &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}, t) \int d^3r' \Psi(\mathbf{r}', t) \times \\ &\times \exp[i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')/\hbar] = \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}, t) \int d^3r' \Psi(\mathbf{r}', t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \\ &= \int d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1. \end{aligned} \quad (8)$$

Поэтому  $|\Phi(\mathbf{p}, t)|^2$  можно считать плотностью вероятности найти частицу с импульсом  $\mathbf{p}$  в интервале импульсов  $d^3p/(2\pi\hbar)^3$ :

$$dW(\mathbf{p}, t) = |\Phi(\mathbf{p}, t)|^2 \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Как мы увидим позже, нельзя одновременно точно измерить и координату частицы, и её импульс. Функцию  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  называют волновой функцией в координатном представлении, а функцию  $\Phi(\mathbf{p}, t)$  называют волновой функцией в импульсном представлении. Подчеркнём, что обе функции содержат одинаковую информацию о поведении частицы.

Вероятностная интерпретация позволяет найти различные средние, например

$$\langle \mathbf{f}(\mathbf{r}) \rangle = \int d^3r f(\mathbf{r}) |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2, \quad \langle \mathbf{g}(\mathbf{p}) \rangle = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} g(\mathbf{p}) |\Phi(\mathbf{p}, t)|^2,$$

где  $f(\mathbf{r})$  и  $g(\mathbf{p})$  – произвольные функции. Используя связь между  $\Phi(\mathbf{p}, t)$  и  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , нетрудно показать, что

$$\begin{aligned} \langle f(\mathbf{r}) \rangle &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \Phi^*(\mathbf{p}, t) f(i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}) \Phi(\mathbf{p}, t), \\ \langle g(\mathbf{p}) \rangle &= \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}, t) g(-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}) \Psi(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (9)$$

где функции от операторов понимаются в смысле разложения в ряд Тейлора:

$$f(y) = \sum_n a_n y^n \Rightarrow f(\hat{A}) = \sum_n a_n \hat{A}^n.$$

Например:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} \rangle &= \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \Phi^*(\mathbf{p}, t) \mathbf{p} \Phi(\mathbf{p}, t) = \\ &= \int d^3 r \Psi^*(\mathbf{r}, t) \int d^3 r' \Psi(\mathbf{r}', t) \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \mathbf{p} \exp[i\mathbf{p} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')/\hbar] = \\ &= \int d^3 r \Psi^*(\mathbf{r}, t) \int d^3 r' \Psi(\mathbf{r}', t) i\hbar \nabla_{\mathbf{r}'} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}) = \\ &= \int d^3 r \Psi^*(\mathbf{r}, t) (-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}}) \Psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (10)$$

Из формулы (9) можно сделать вывод о том, что  $i\hbar \nabla_{\mathbf{p}}$  является оператором координаты в импульсном представлении, а  $-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}}$  является оператором импульса в координатном представлении.

Введём определение матричного элемента  $\langle 2|\hat{A}|1 \rangle$  (дираковское обозначение) оператора  $\hat{A}$  между состояниями  $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$  и  $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ :

$$\langle 2|\hat{A}|1 \rangle \equiv \int d^3 r \Psi_2^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \Psi_1(\mathbf{r}, t) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi\hbar)^3} \Phi_2^*(\mathbf{p}, t) \hat{A} \Phi_1(\mathbf{p}, t).$$

Таким образом, введенное выше среднее значение какой-то величины — это диагональный матричный элемент соответствующего оператора. Интеграл

$$\int d^3 r \Psi_2^*(\mathbf{r}, t) \Psi_1(\mathbf{r}, t)$$

называется скалярным произведением функций  $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$  и  $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ . Если это произведение равно нулю, то говорят, что функции  $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$  и  $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$  ортогональны.

## 2.2. Эвристический подход к соотношению неопределённостей

Рассмотрим волновую функцию вида  $\Psi(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r} - \mathbf{X}) \exp(i\mathbf{P} \cdot \mathbf{r}/\hbar)$ , где  $f(\mathbf{r})$  — плавная вещественная функция, убывающая на бесконечности, имеющая пик в точке  $\mathbf{r} = 0$  и ширину этого пика  $\delta x \sim a$ , например, выберем  $f(\mathbf{r}) = \exp[-\mathbf{r}^2/a^2]$ . Тогда из свойств преобразования Фурье следует, что функция  $\Phi(\mathbf{p}, t)$  имеет вид

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{p}, t) &= \int d^3 r f(\mathbf{r} - \mathbf{X}) \exp[i(\mathbf{P} - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{r}/\hbar] = \exp[i(\mathbf{P} - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{X}/\hbar] \times \\ &\times \int d^3 r f(\mathbf{r}) \exp[i(\mathbf{P} - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{r}/\hbar] = \exp[i(\mathbf{P} - \mathbf{p}) \cdot \mathbf{X}/\hbar] g(\mathbf{p}), \end{aligned} \quad (11)$$

$g(\mathbf{p})$  – плавная функция, убывающая на бесконечности, имеющая пик в точке  $\mathbf{p} = \mathbf{P}$  и ширину этого пика  $\delta p \sim \hbar/a$ . В нашем примере функция  $g(\mathbf{p})$  имеет вид  $g(\mathbf{p}) = (\pi a^2)^{3/2} \exp[-(\mathbf{P} - \mathbf{p})^2 a^2 / (4\hbar^2)]$ , поэтому

$$\delta x \delta p \sim \hbar.$$

Это так называемое соотношение неопределённостей, из которого следует, что нельзя одновременно точно измерить и координату частицы, и её импульс. Точную формулировку соотношения неопределённостей мы обсудим позже, а пока покажем, как можно использовать это соотношение для оценки энергии основного состояния системы и размера волновой функции.

Рассмотрим электрон в кулоновском потенциале  $U(r) = -Ze^2/r$ . Предположим, что  $\Psi(\mathbf{r})$  – плавная колоколообразная функция с максимумом в нуле и с характерным размером  $L$ . Тогда из соотношения неопределённостей следует, что  $\langle p^2 \rangle \sim (\delta p)^2 \sim \hbar^2/L^2$ , средняя кинетическая энергия будет порядка  $\bar{T} \sim \hbar^2/(2m_e L^2)$ , средняя потенциальная энергия  $\bar{U} \sim -Ze^2/L$ , и полная энергия

$$E(L) \sim \frac{\hbar^2}{2m_e L^2} - \frac{Ze^2}{L}.$$

Минимум  $E(L)$  достигается при  $L = L^* = \hbar^2/(m_e Ze^2) = a_B/Z$ , причём  $E(L^*) = -m_e Z^2 e^4 / (2\hbar^2) = -Z^2 R_y$ . Конечно, такая оценка не может претендовать на правильный коэффициент, но она даёт правильный масштаб волновой функции и энергии электрона в кулоновском поле.

Рассмотрим ещё один важный пример одномерной задачи, в которой частица совершает финитное движение в потенциальной яме, т. е. в потенциале притяжения с характерной глубиной  $U_0$  и шириной  $a$ . Если мы сосредоточим волновую функцию внутри ямы, то  $\bar{T} \sim \hbar^2/(2ma^2)$ ,  $\bar{U} \sim -U_0$  и  $E \sim \hbar^2/(2ma^2) - U_0$ . Если  $\hbar^2/(ma^2) \gg U_0$  (такая яма называется мелкой), то  $E > 0$  и частица не может совершать финитное движение. Как мы увидим, в мелкой яме характерный размер волновой функции  $L \gg a$ . Тогда вероятность найти частицу в яме равна  $W \sim a \psi^2(0) \sim a/L$ , поскольку  $\psi^2(0)L \sim 1$ . В результате

$$E(L) \sim \frac{\hbar^2}{2mL^2} - U_0 \frac{a}{L}.$$

Минимум  $E(L)$  достигается при

$$L_0 = \frac{\hbar^2}{maU_0} = \frac{\hbar^2}{ma^2U_0} a \gg a, \quad E(L_0) = -\frac{m(aU_0)^2}{2\hbar^2} = -\frac{ma^2U_0}{2\hbar^2} U_0 \gg -U_0.$$

Таким образом мы приходим к удивительному результату: в случае мелкой ямы частица, совершающая финитное движение, основное время проводит вне ямы – это чисто квантовый эффект! Заметим, что и  $L_0$ , и  $E(L_0)$  зависят от параметров потенциала в виде произведения  $G = aU_0$ . Поэтому

мелкую яму в одномерном случае можно заменить на  $U(x) = -G\delta(x)$ , где  $G = -\int U(x)dx$ .

Волновая функция частицы, находящейся в состоянии с наименьшей энергией в глубокой яме,  $\hbar^2/(ma^2) \ll U_0$ , локализована внутри ямы,  $L \sim a$ .

Рассмотрим теперь свободное одномерное движение частицы,  $U(x) = 0$ . Пусть при  $t = 0$  волновая функция имела вид  $\Psi(x, 0) = f(x) \exp(iPx/\hbar)$ , где  $f(x)$  — плавная вещественная колоколообразная функция с максимумом в нуле и с характерным размером  $a$ . Тогда  $\Phi(p, 0)$  будет плавной колоколообразной функцией с максимумом в точке  $P$  и с шириной  $\hbar/a$ . Используя линейность уравнения Шредингера, находим, что

$$\Psi(x, t) = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \Phi(p, 0) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \left( px - \frac{p^2}{2m} t \right) \right].$$

Спрашивается, как будет себя вести  $|\Psi(x, t)|$  со временем. Можно утверждать, что  $|\Psi(x, t)|$  будет представлять собой колоколообразную функцию с максимумом в точке  $x = vt = Pt/m$  и с характерным размером, который будет расти со временем. Время расплывания пакета (время, за которое ширина пакета увеличится вдвое) будет  $\tau \sim ma^2/\hbar$ , оно не зависит от  $P$ . Действительно, как следует из соотношения неопределённостей, разброс скоростей в пакете будет  $\delta v \sim \delta p/m \sim \hbar/(ma)$ . Время расплывания определяется условием  $\delta v \tau \sim a$ , или  $\tau \sim ma^2/\hbar$ . В пределе  $\hbar \rightarrow 0$ , как и должно быть, время расплывания стремится к бесконечности. Для макроскопических параметров  $m \sim 1$  г и  $a \sim 1$  см имеем  $\tau \sim 10^{27}$  с!

**Задача 2.1** Пусть  $U(x) = 0$  и  $\Psi(x, 0) = A \exp[-x^2/(2a^2)]$ , где  $A^2 = 1/(\sqrt{\pi} a)$ . Показать, что

$$|\Psi(x, t)|^2 = (A^2/\sqrt{D}) \exp[-x^2/(a^2 D)], \quad D = 1 + (t/\tau)^2,$$

где  $\tau = ma^2/\hbar$ .

### РАЗДЕЛ 3. ОПЕРАТОРЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

В квантовой механике говорят, что частица с волновой функцией  $\Psi$  находится в состоянии с определённым значением  $a$  некоторой физической величины (т. е. той, которую можно измерить в эксперименте), если волновая функция является собственной функцией соответствующего оператора  $\hat{A}$  с собственным значением  $a$ :  $\hat{A}\Psi = a\Psi$ . Например, волна де Бройля (2) соответствует состоянию с определённым импульсом. Если оператор Гамильтона  $\hat{H}$  не зависит от времени, то состояние с определённой энергией  $E$  является собственной функцией оператора Гамильтона:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi.$$

Оператор  $\hat{A}^+$  называется эрмитово-сопряжённым оператору  $\hat{A}$ , если для любых  $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$  и  $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$  выполняется равенство

$$\int d^3r \Psi_2^*(\mathbf{r}, t) [\hat{A}\Psi_1(\mathbf{r}, t)] = \int d^3r [\hat{A}^+\Psi_2(\mathbf{r}, t)]^* \Psi_1(\mathbf{r}, t). \quad (12)$$

Из этой формулы следует, что  $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$ . Если  $\hat{A}^+ = \hat{A}$ , то оператор  $\hat{A}$  называется эрмитовым, или самосопряжённым. Детали определения эрмитовых и самосопряжённых операторов см. [10] (задача 1.29) и [13] (§ 1.4).

Все собственные значения эрмитовых операторов являются вещественными величинами. Действительно, для  $\Psi_1 = \Psi_2 = \Psi$  и  $\hat{A}\Psi = a\Psi$  из уравнения (12) следует, что  $a^* = a$ . Таким образом, физическим (измеримым) величинам соответствуют эрмитовы операторы. Следует иметь в виду, что выражение «любые функции» означает любые из определённого класса функций. Как правило, таким классом являются функции с конечной нормировкой (с конечным интегралом  $\int d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$ ). Волна де Бройля к этому классу не принадлежит, поскольку для неё  $|\Psi(\mathbf{r}, t)| = 1$ . Докажем, например, что оператор импульса является эрмитовым на классе функций, для которых интеграл  $\int d^3r |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$  конечен. Имеем

$$\begin{aligned} \int d^3r \Psi_2^*(\mathbf{r}, t) (-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}}) \Psi_1(\mathbf{r}, t) &= \int d^3r [i\hbar \nabla_{\mathbf{r}} \Psi_2^*(\mathbf{r}, t)] \Psi_1(\mathbf{r}, t) = \\ &= \int d^3r [-i\hbar \nabla_{\mathbf{r}} \Psi_2(\mathbf{r}, t)]^* \Psi_1(\mathbf{r}, t), \end{aligned}$$

где мы воспользовались интегрированием по частям и выкинули внеинтегральные члены, считая функции убывающими на бесконечности.

Докажем ортогональность волновых функций  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$ , являющихся собственными функциями эрмитова оператора  $\hat{A}$  с разными собственными значениями. Пусть  $\hat{A}\Psi_1 = a_1\Psi_1$  и  $\hat{A}\Psi_2 = a_2\Psi_2$  и  $a_1 \neq a_2$ . Из (12) следует, что

$$a_1 \int d^3r \Psi_2^*(\mathbf{r}, t) \Psi_1(\mathbf{r}, t) = a_2 \int d^3r \Psi_2^*(\mathbf{r}, t) \Psi_1(\mathbf{r}, t). \quad (13)$$

С учётом того, что  $a_1 \neq a_2$ , получаем

$$\int d^3r \Psi_2^*(\mathbf{r}, t) \Psi_1(\mathbf{r}, t) = 0.$$

### 3.1. Коммутаторы операторов, теорема о вириале, соотношение полноты

*Определение:* коммутатором двух операторов  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  называется выражение  $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \equiv [\hat{A}, \hat{B}]$ . Коммутатор является важнейшим объектом в квантовой механике. Простым использованием определения коммутатора и свойства  $(\hat{A}\hat{B})^+ = \hat{B}^+\hat{A}^+$ , легко показать, что

$$\begin{aligned} [\hat{A}, \hat{B}] &= -[\hat{B}, \hat{A}], \quad [\hat{A}, \hat{B}]^+ = -[\hat{A}^+, \hat{B}^+], \\ [\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}], \\ [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}], \\ [\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\hat{D}] &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C}\hat{D} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]\hat{D} + \hat{B}\hat{C}[\hat{A}, \hat{D}]. \end{aligned} \tag{14}$$

**Задача 3.1.** Докажите тождество (Якоби):

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

Вычислим теперь несколько полезных коммутаторов. Начнём с коммутатора  $[\hat{p}, \hat{x}]$ . Подействуем этим коммутатором на произвольную функцию  $\psi(x)$ , имеем

$$[\hat{p}, \hat{x}]\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (x\psi(x)) - x \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \right) = -i\hbar \psi(x).$$

Поскольку  $\psi(x)$  — произвольная функция, то

$$[\hat{p}, \hat{x}] = -i\hbar. \tag{15}$$

(Именно эта формула написана на могиле Макса Борна в Гёттингене). Для трёхмерного случая имеем

$$[\hat{p}_a, \hat{x}_b] = -i\hbar \delta_{ab} \quad a, b = 1, 2, 3. \tag{16}$$

Аналогично доказываются формулы

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

Рассмотрим собственную функцию  $\Psi$  эрмитова оператора  $\hat{A}$ ,  $\hat{A}\Psi = a\Psi$ . Тогда справедливо важное утверждение

$$\langle \Psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \Psi \rangle \equiv \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}) [\hat{A}, \hat{B}] \Psi(\mathbf{r}) = 0, \tag{17}$$

где  $\hat{B}$  — произвольный оператор. Попробуем теперь воспользоваться этой формулой для свободного движения, выбрав в качестве  $\hat{A}$  — оператор Гамильтона  $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m)$ , а в качестве  $\hat{B}$  — оператор  $\mathbf{r}$ . Собственной функцией гамильтониана будет волна де Бройля. Так как

$$\left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}, \mathbf{r} \right] = - \left[ \mathbf{r}, \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} \right] = -i\hbar \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m},$$

то, следуя доказанной теореме, мы должны заключить, что среднее значение оператора импульса по состоянию с определённым импульсом (волна де Бройля) равно нулю, что является абсурдом! Объяснение «парадокса» состоит в том, что волна де Бройля не является нормируемой функцией и, следовательно, на таких функциях оператор Гамильтона не является эрмитовым. Однако, если мы рассмотрим локализованные (т. е. имеющие конечный интеграл  $\int d^3r |\Psi(\mathbf{r})|^2$ ) собственные состояния гамильтониана  $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m) + U(\mathbf{r})$ , то действительно, среднее значение оператора  $\hat{\mathbf{p}}$  по таким состояниям будет равно нулю.

**Задача 3.2.** Показать, что  $\langle \Psi_{\mathbf{p},R} | \hat{\mathbf{p}} | \Psi_{\mathbf{p},R} \rangle = \mathbf{p}$  в пределе  $\lambda \rightarrow 0$ , где  $\Psi_{\mathbf{p},R} = \sqrt{\lambda^3/\pi} \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar - \lambda r)$  — регуляризованная волна де Бройля. Используя эрмитовость оператора кинетической энергии, показать, что в пределе  $\lambda \rightarrow 0$  выполняется равенство

$$\left\langle \Psi_{\mathbf{p},R} \left| \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m}, \mathbf{r} \right] \right| \Psi_{\mathbf{p},R} \right\rangle = \frac{\mathbf{p}}{m}.$$

Продемонстрируем важность теоремы (17) на примере доказательства теоремы о вириале. В качестве  $\hat{A}$  выберем гамильтониан  $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/(2m) + U(\mathbf{r})$ , в качестве  $\hat{B}$  — оператор  $\mathbf{r} \cdot \hat{\mathbf{p}}$  и  $\hat{H}\Psi = E\Psi$ , где  $\Psi$  — состояние с конечной нормировкой, отвечающее финитному движению.

Тогда

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

В результате приходим к теореме о вириале:

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

Из теоремы следует, что для осцилляторного потенциала  $U(r) = m\omega^2 r^2/2$  среднее значение кинетической энергии  $\langle T \rangle$  равно среднему значению потенциальной энергии  $\langle U \rangle$  и равно  $E/2$ , а для кулоновского потенциала взаимодействия  $U(r) = -e^2/r$  имеем  $\langle T \rangle = -E$  и  $\langle U \rangle = 2E$ .

Рассмотрим эрмитов оператор  $\hat{A}$ , отвечающий некоторой физической (т. е. измеримой) величине с набором собственных значений  $\{a_n\}$ , соответствующих нормированным собственным функциям  $\{\psi_n\}$ . Если частицу, описываемую волновой функцией  $\Psi$ , можно обнаружить в состоянии с одним из

значений  $a_n$ , то  $\Psi$  можно представить в виде разложения

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n. \quad (18)$$

Если  $\psi_n$  и  $\psi_k$  отвечают собственным значениям  $a_n \neq a_k$ , то  $\psi_n$  и  $\psi_k$  ортогональны. Если одному значению  $a_n$  отвечают две (и более) разные функции  $\psi_n$  и  $\psi_k$  (наличие вырождения), то можно подобрать такие линейные комбинации  $\psi_n$  и  $\psi_k$ , чтобы они были ортогональны. Ниже будем считать совокупность  $\{\psi_n\}$  ортогональным базисом. Поэтому коэффициенты  $c_n$  в разложении (18) равны

$$c_n = \int d^3r \psi_n^*(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}), \quad (19)$$

т. е.  $c_n$  можно считать проекцией  $\Psi$  на  $\psi_n$ . Используя нормировку  $\Psi$  и ортогональность  $\{\psi_n\}$ , получаем

$$\sum_n |c_n|^2 = 1.$$

Поэтому коэффициент  $c_n$  называют амплитудой вероятности найти частицу, описываемую волновой функцией  $\Psi$ , в состоянии  $\psi_n$ , а  $|c_n|^2$  является вероятностью найти частицу, описываемую волновой функцией  $\Psi$ , в состоянии  $\psi_n$ . Обобщая, можно сказать, что  $C = \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle$  является амплитудой вероятности найти частицу, описываемую волновой функцией  $\Psi_1$ , в состоянии  $\Psi_2$ , а  $|C|^2$  является вероятностью найти частицу, описываемую волновой функцией  $\Psi_1$ , в состоянии  $\Psi_2$ . Так как  $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = C^*$ , то вероятность найти частицу, описываемую волновой функцией  $\Psi_1$ , в состоянии  $\Psi_2$  равна вероятности найти частицу, описываемую волновой функцией  $\Psi_2$ , в состоянии  $\Psi_1$ .

Подставляя выражение (19) в (18), получаем равенство

$$\Psi(\mathbf{r}) = \int d^3r' \left[ \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') \right] \Psi(\mathbf{r}'),$$

которое должно выполняться при любой функции  $\Psi$ . Это возможно только тогда, когда выполняется так называемое соотношение полноты:

$$\sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (20)$$

Если сопоставить функции  $\psi$  обозначение  $|\psi\rangle$ , а функции  $\psi^*$  обозначение  $\langle\psi|$ , то уравнение (20) можно символически записать в виде

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



Сделаем замечание относительно дираковского обозначения  $|\Psi\rangle$ . Это обозначение аналогично обозначению вектора в алгебре. Оно подчёркивает тот факт, что состояние системы  $\Psi$  не зависит от способа его описания (точка не зависит от системы координат, а координаты точки зависят). Мы можем описывать систему в координатном представлении (тогда  $\Psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle$ ), или в импульсном (тогда  $\Phi(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \Psi \rangle$ ). При этом  $\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar)$  и  $\langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle = \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar)$ . Обозначение  $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$  соответствует скалярному произведению состояний  $\Psi_2$  и  $\Psi_1$ , и это скалярное произведение не зависит от способа описания состояний. Заметим, что  $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \langle \Psi_2 | \Psi_1 \rangle^*$ . Состояния с определёнными импульсами  $\mathbf{p}$ ,  $\mathbf{p}'$  и с определёнными координатами  $\mathbf{r}$ ,  $\mathbf{r}'$  удовлетворяют соотношениям:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle &= \int d^3r \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \mathbf{p}' \rangle = \int d^3r \exp(-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}/\hbar) \exp(i\mathbf{p}' \cdot \mathbf{r}/\hbar) = \\ &= (2\pi\hbar)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \\ \langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (21)$$

**Задача 3.3.** Доказать, что оператором плотности числа частиц  $\hat{\rho}_{\mathbf{X}}$  и оператором плотности тока  $\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{X}}$ , для которых средние значения по волновой функции  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  равны плотности  $\rho(\mathbf{X}, t)$  и  $\mathbf{j}(\mathbf{X}, t)$ , являются операторы

$$\hat{\rho}_{\mathbf{X}} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{X}), \quad \hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{X}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{2m} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{X}) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{X}) \frac{\hat{\mathbf{p}}}{2m}.$$

## 3.2. Соотношение неопределённостей

Перейдём к строгой формулировке соотношения неопределённостей. С учётом того, что  $(\hat{\mathcal{A}}^+)^+ = \hat{\mathcal{A}}$ ,

$$\langle \Psi | \hat{\mathcal{A}}^+ \hat{\mathcal{A}} | \Psi \rangle = \int d^3r (\hat{\mathcal{A}}\Psi)^* (\hat{\mathcal{A}}\Psi) = \int d^3r |\hat{\mathcal{A}}\Psi|^2 \geq 0. \quad (22)$$

Равенство достигается тогда, когда  $\hat{\mathcal{A}}\Psi = 0$ . Рассмотрим два эрмитова оператора  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  и оператор  $\hat{\mathcal{A}} = \hat{A} + i\lambda\hat{B}$ , где  $\lambda$  — некоторое вещественное число. Обозначим  $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$ . С учётом свойств коммутаторов,  $\hat{C}$  является эрмитовым оператором,  $\hat{C}^+ = \hat{C}$ . Тогда

$$\hat{\mathcal{A}}^+ \hat{\mathcal{A}} = \hat{A}^2 + \lambda^2 \hat{B}^2 - \lambda \hat{C}.$$

Из (22) находим,

$$\langle \hat{A}^2 \rangle + \lambda^2 \langle \hat{B}^2 \rangle - \lambda \langle \hat{C} \rangle \geq 0, \quad (23)$$

где подразумевается конечность средних значений всех операторов.

Минимум по  $\lambda$  левой части достигается при  $\lambda = \langle \hat{C} \rangle / (2\langle \hat{B}^2 \rangle)$ . В результате неравенство имеет вид

$$\langle \hat{A}^2 \rangle \langle \hat{B}^2 \rangle \geq \frac{\langle \hat{C} \rangle^2}{4}. \quad (24)$$

Это же неравенство выполняется, если операторы  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$  заменить на  $\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$  и  $\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle$ . Величина  $\sqrt{\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle}$  называется дисперсией и обозначается  $\Delta A$ . Дисперсию можно также записать как  $\Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}$ . Значение  $\Delta A$  является неопределённостью физической величины  $A$  в состоянии  $\Psi$ . Окончательно, из уравнения (24) получаем соотношение неопределённостей

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{C} \rangle|. \quad (25)$$

Из этого соотношения следует, что если  $|\langle \hat{C} \rangle| \neq 0$ , то невозможно одновременно измерить с бесконечной точностью физические величины, соответствующие операторам  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ . С учётом коммутационного соотношения между операторами координаты и импульса соответствующее соотношение неопределённостей имеет вид

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (26)$$

Интересно выяснить, какой вид должна иметь волновая функция, чтобы минимизировать соотношение неопределённостей для координаты и импульса (чтобы неравенство стало равенством). Уравнение  $\hat{\mathcal{A}}\Psi = 0$ , где

$$\mathcal{A} = \hat{x} - \langle x \rangle + i \frac{\hbar}{2(\Delta p)^2} (\hat{p} - \langle p \rangle),$$

можно представить в следующем виде

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi = \left[ i \frac{\langle p \rangle}{\hbar} - \frac{2(\Delta p)^2}{\hbar^2} (x - \langle x \rangle) \right] \Psi.$$

Решая это дифференциальное уравнение, окончательно получаем гауссовский пакет

$$\Psi(x) = N \exp \left[ i \frac{\langle p \rangle x}{\hbar} - \frac{(\Delta p)^2}{\hbar^2} (x - \langle x \rangle)^2 \right],$$

где  $N$  — нормировочный коэффициент.

### 3.3. Одновременная измеримость величин

Предположим, что  $\Psi$  есть собственная функция эрмитова оператора  $\hat{B}$  с собственным значением  $b$ , и в спектре оператора  $\hat{B}$  нет вырождения. Пусть  $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ . Покажем, что  $\Psi$  является собственной функцией оператора  $\hat{A}$ . Для этого умножим обе части равенства  $\hat{B}\Psi = b\Psi$  на  $\hat{A}$  и воспользуемся тем, что  $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ . Получаем, что  $\hat{B}(\hat{A}\Psi) = b(\hat{A}\Psi)$ . Из отсутствия вырождения в спектре оператора  $\hat{B}$  следует, что  $\hat{A}\Psi = a\Psi$ . Таким образом,  $\Psi$  является одновременно собственной функцией  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ , т. е. обе соответствующие физические

величины можно одновременно измерить. Если в спектре оператора  $\hat{B}$  есть вырождение, то *можно* выбрать такие линейные комбинации вырожденных функций оператора  $\hat{B}$ , что они будут собственными функциями оператора  $\hat{A}$ . Если  $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \neq 0$ , то  $\Psi$  может быть одновременно собственной функцией  $\hat{A}$  и  $\hat{B}$ , только если  $\hat{C}\Psi = 0$ . Действительно,  $\hat{A}\hat{B}\Psi = ab\Psi$  и  $\hat{B}\hat{A}\Psi = ab\Psi$ . Вычитая из одного равенства другое, получаем  $\hat{C}\Psi = 0$ , что, как правило, не выполняется. Например, для операторов  $\hat{x}$  и  $\hat{p}$  имеем  $\hat{C} = \hbar$ .

## РАЗДЕЛ 4. СОСТОЯНИЯ С ОПРЕДЕЛЁННОЙ ЭНЕРГИЕЙ

Пусть оператор Гамильтона  $\hat{H}$  не зависит от времени. Тогда состояния с определённой энергией удовлетворяют уравнению  $\hat{H}\Psi = E\Psi$ . В результате уравнение Шредингера

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

отвечающее состоянию с определённой энергией  $E$ , имеет решение

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp(-iEt/\hbar)\psi(\mathbf{r}).$$

Пусть при  $t = 0$  волновая функция  $\Psi(\mathbf{r}, 0)$  равна  $\phi(\mathbf{r})$ . Как уже говорилось, совокупность собственных функций  $\{\psi_n(\mathbf{r})\}$  гамильтониана  $\hat{H}$  с соответствующими энергиями  $\{E_n\}$  является полным набором, т. е.

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}), \quad c_n = \langle \psi_n | \phi \rangle = \int d^3r \psi_n^*(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}).$$

Тогда из линейности уравнения Шредингера следует, что

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

Эта формула решает задачу о нахождении зависимости волновой функции от времени и координаты при известной волновой функции в начальный момент времени.

### 4.1. Состояния с определённой энергией в одномерном случае

Рассмотрим одномерное стационарное уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (27)$$

где  $\psi'(x) \equiv \frac{d}{dx}\psi(x)$ . Предположим, что существуют два решения,  $\psi_1(x)$  и  $\psi_2(x)$ , с одной и той же энергией  $E$ . Записав уравнение (27) для  $\psi_1(x)$  и  $\psi_2(x)$ , умножив первое слева на  $\psi_2(x)$ , а второе на  $\psi_1(x)$  и вычитая из первого уравнения второе, получим уравнение

$$\psi_2(x)\psi_1''(x) - \psi_1(x)\psi_2''(x) = 0,$$

которое можно переписать в виде

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

Таким образом,

$$\psi_2(x)\psi_1'(x) - \psi_1(x)\psi_2'(x) = \text{const}. \quad (28)$$

Назовём локализованными такие состояния, для которых  $|\psi(x)| \rightarrow 0$  при  $|x| \rightarrow \infty$ . Для локализованных состояний  $\text{const} = 0$  в уравнении (28), так что

$$\frac{\psi_1'(x)}{\psi_1(x)} = \frac{\psi_2'(x)}{\psi_2(x)} \Rightarrow \psi_1(x) = \lambda\psi_2(x).$$

С учётом нормировки имеем  $|\lambda| = 1$ . Постоянная фаза не влияет на наблюдаемые величины, так что для локализованных состояний в одномерном случае вырождения нет.

Возьмём комплексное сопряжение от обеих сторон уравнения Шредингера (27). Мы видим, что если  $\psi(x)$  — решение стационарного уравнения Шредингера, то  $\psi^*(x)$  также является решением уравнения Шредингера с той же энергией. Поскольку для локализованных состояний в одномерном случае вырождения нет, то  $\psi(x)$  и  $\psi^*(x)$  могут отличаться только постоянной фазой, которую всегда можно выбрать равной нулю. Таким образом, в одномерном случае волновые функции локализованных состояний являются вещественными величинами.

Рассмотрим важный случай одномерного симметричного потенциала,  $U(-x) = U(x)$ . Сделав в стационарном уравнении Шредингера (27) замену  $x \rightarrow -x$ , получаем, что если  $\psi(x)$  — решение стационарного уравнения Шредингера, то  $\psi(-x)$  также является решением уравнения Шредингера с той же энергией. Поскольку для локализованных состояний в одномерном случае вырождения нет, то  $\psi(-x) = \pm\psi(x)$ , т. е. все решения будут или симметричными, или антисимметричными.

## 4.2. Осцилляционная теорема

Для понимания свойств состояний с определенной энергией в одномерном случае важную роль играет так называемая осцилляторная теорема, которую мы сформулируем без доказательства. Будем нумеровать волновые функции локализованных состояний индексом  $n$  в порядке увеличения энергии, начиная с  $n = 0$ . Также будем считать, что потенциал  $U(x)$  не обращается в бесконечность при любом конечном  $x$ . Тогда функция  $\psi_n(x)$  будет иметь ровно  $n$  нулей (кроме нулей на  $\pm\infty$ ), а волновая функция  $\psi_0(x)$  основного состояния нулей иметь не будет. Можно также показать, что между двумя соседними нулями волновой функции  $\psi_n(x)$  находится ровно один ноль волновой функции  $\psi_{n+1}(x)$ . Из осцилляторной теоремы следует, что для симметричного потенциала  $U(x) = U(-x)$  симметричные волновые функции будут иметь чётное количество нулей, а антисимметричные функции — нечётное количество нулей. Уровни энергии, отвечающие симметричным и антисимметричным решениям, в спектре чередуются.

### 4.3. Дискретный спектр локализованных состояний

Стационарное уравнение Шредингера (27) является дифференциальным уравнением второго порядка, которое при произвольной энергии  $E$  имеет два решения, которые, вообще говоря, растут при  $x \rightarrow +\infty$  или  $x \rightarrow -\infty$  (или при  $x \rightarrow \pm\infty$ ). Только при определённых дискретных значениях  $E$  волновые функции убывают при  $|x| \rightarrow \infty$ . Таким образом, дискретный спектр определяется требованием убывания волновых функций на бесконечности. Разберём несколько важных примеров.

#### 1. Бесконечно глубокая потенциальная яма

Будем отсчитывать энергию от дна ямы ( $E > 0$ ), т. е. считать, что  $U(x) = 0$  при  $|x| < a/2$  и  $U(\pm a/2) = +\infty$ . Так как вне бесконечно глубокой ямы частица не может быть обнаружена, то  $\psi(x) = 0$  при  $|x| \geq a/2$ . Поэтому, из непрерывности волновой функции следует, что  $\psi(\pm a/2) = 0$ . В нашем случае уравнение Шредингера имеет вид

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

решение которого или  $\psi_s = N \cos(kx)$  (симметричное решение), или  $\psi_a = N \sin(kx)$  (антисимметричное решение), здесь  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ , а  $N$  определяется условием нормировки. Из граничного условия следует, что для  $\psi_s$

$$ka = (2n + 1)\pi, \quad E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(2n + 1)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$

а для  $\psi_a$

$$ka = (2n)\pi, \quad E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(2n)^2, \quad n = 1, 2, \dots$$

Коэффициент  $N = \sqrt{2/a}$  для  $\psi_s$  и  $\psi_a$ . Заметим, что  $\psi'(\pm a/2) \neq 0$ , т. е. производная испытывает на границе разрыв из-за того, что яма бесконечно глубокая.

#### 2. Яма конечной глубины: $U(x) = -U_0\theta(a/2 - |x|)$ , $U_0 > 0$

Мы ищем решения с энергией  $E$ :  $-U_0 < E < 0$ . Уравнение Шредингера имеет вид

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' &= -|E|\psi & |x| > a/2, \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' &= (U_0 - |E|)\psi & |x| < a/2. \end{aligned} \tag{29}$$

Все решения можно разделить на симметричные и антисимметричные. Симметричные решения имеют вид

$$\psi_s(x) = \theta(a/2 - |x|) A \cos(\kappa x) + \theta(|x| - a/2) B \exp(-k|x|),$$

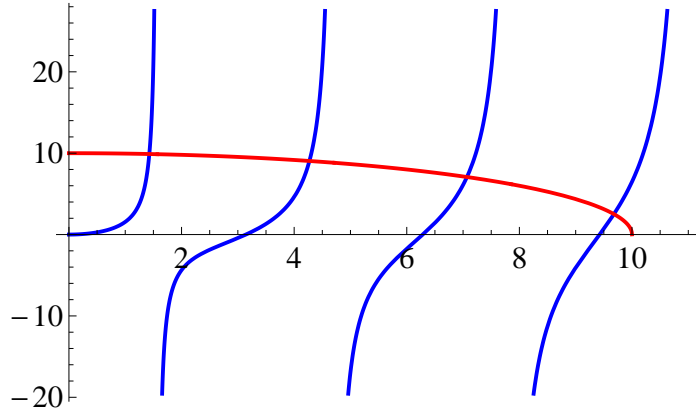


Рис. 1. Графическое решение для ямы конечной глубины в случае симметричной волновой функции: см. уравнение (31). Параметр  $g = 10$

где

$$k = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(U_0 - |E|)}}{\hbar},$$

$A$  и  $B$  — некоторые числа и  $\theta(y) = 1$  при  $y \geq 0$  и  $\theta(y) = 0$  при  $y < 0$ . Антисимметричные решения имеют вид

$$\psi_a(x) = \theta(a/2 - |x|) A' \sin(\kappa x) + \text{sign}(x) \theta(|x| - a/2) B' \exp(-k|x|),$$

где  $\text{sign}(y) = \theta(y) - \theta(-y)$ .

Разделение решений на симметричные и антисимметричные позволяет написать условие непрерывности функции и производной только на одной границе, например, при  $x = a/2$ . Для симметричных решений эти условия приводят к уравнению

$$\text{tg} \left( \frac{\kappa a}{2} \right) = \frac{k}{\kappa}. \quad (30)$$

Переменные  $k$  и  $\kappa$  не являются независимыми,  $k^2 + \kappa^2 = 2mU_0/\hbar^2$ . Переходя к переменной  $y = \kappa a/2$ , и учитывая, что  $ka/2 = \sqrt{g^2 - y^2}$ , где  $g^2 = mU_0 a^2/(2\hbar^2)$ , перепишем (30) в виде

$$y \text{tg} y = \sqrt{g^2 - y^2}. \quad (31)$$

Это уравнение можно решать численно: см. рис. 1.

Из сравнения графиков левой (синяя кривая) и правой (красная кривая) части видно, что количество решений зависит от величины  $g$ . Если  $n\pi < g < (n+1)\pi$ , то количество решений равно  $n+1$ .

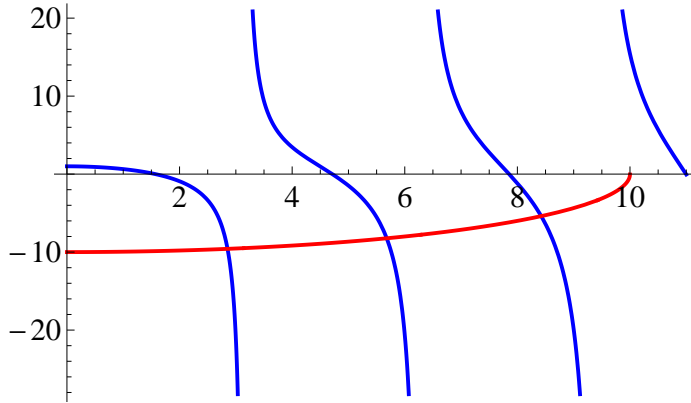


Рис. 2. Графическое решение для ямы конечной глубины в случае антисимметричной волновой функции: см. уравнение (32). Параметр  $g = 10$

Аналогично, для антисимметричного решения дисперсионное уравнение (уравнение на энергию) имеет вид:

$$y \operatorname{ctg} y = -\sqrt{g^2 - y^2}. \quad (32)$$

Это уравнение также можно решать численно: см. рис. 2.

Если  $\pi(n-1/2) < g < \pi(n+1/2)$ , то количество решений равно  $n$ . Поэтому, при  $g < \pi/2$  антисимметричных решений нет, а симметричные решения есть всегда.

При  $g \ll 1$  (мелкая яма) имеем  $y \ll 1$  и уравнение (31) приобретает вид  $y^2 = \sqrt{g^2 - y^2}$  или  $y^2 \approx g^2 - g^4$ , т. е. существует только один чётный уровень, для которого

$$k^2 = \frac{4g^4}{a^2}, \quad E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{ma^2 U_0^2}{2\hbar^2}.$$

### 3. Мелкая яма

Как уже говорилось, при  $U_0 \ll \hbar^2/(ma^2)$ , одномерный потенциал можно заменить на  $U(x) = -G\delta(x)$ . Фактически, роль  $\delta$ -функции сводится к условию на скачок производной при  $x = 0$ . Проинтегрировав уравнение Шредингера

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

по  $x$  от  $-\epsilon$  до  $\epsilon$  и устремив  $\epsilon$  к нулю, получим

$$-\frac{\hbar^2}{2m}[\psi'(+0) - \psi'(-0)] - G\psi(0) = 0,$$



$$\psi'(+0) - \psi'(-0) = -\frac{2mG}{\hbar^2}\psi(0).$$

Для  $E < 0$  уравнение Шредингера при  $x \neq 0$  имеет вид

$$\psi'' = k^2\psi \Rightarrow \psi = N \exp(-k|x|), \quad k = \sqrt{2m|E|}/\hbar.$$

Условие на скачок производной даёт

$$k = \frac{mG}{\hbar^2}, \quad E = -\frac{mG^2}{2\hbar^2}, \quad N = \sqrt{k}.$$

Таким образом, в мелкой яме есть только одно локализованное состояние.

#### 4. Гармонический осциллятор: $U(x) = m\omega^2 x^2/2$

Для степенного потенциала удобно перейти от переменных  $x$  и  $E$  к безразмерным переменным  $y$  и  $\varepsilon$ :  $x = \sqrt{\hbar/(m\omega)} y$  и  $E = \hbar\omega \varepsilon$ . В этих переменных уравнение Шредингера имеет вид:

$$-\frac{d^2}{dy^2} \psi + y^2 \psi = 2\varepsilon \psi.$$

Обычный способ решения таких уравнений состоит в том, что сначала находится асимптотика решения при больших  $|y|$  (в нашем случае это  $\exp(-y^2/2)$ ), а затем делается подстановка  $\psi(y) = F(y) \exp(-y^2/2)$ . Функция  $F$  удовлетворяет следующему уравнению

$$F'' - 2yF' + (2\varepsilon - 1)F = 0.$$

Подставляя  $F$  в уравнение в виде степенного ряда,  $F(y) = \sum_n c_n y^n$ , и приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях  $y$ , находим рекуррентное соотношение

$$c_{n+2} = \frac{2n + 1 - 2\varepsilon}{(n + 2)(n + 1)} c_n.$$

Для того чтобы ряд оборвался, необходимо, чтобы  $\varepsilon = N + 1/2$ , где  $N$  — некоторое целое число. Если ряд не оборвётся, то при больших  $n$  рекуррентное соотношение будет  $c_{n+2} \approx 2c_n/n$  или  $F \propto \exp(y^2)$ , т. е. мы придём к экспоненциально растущему решению  $\psi \propto \exp(y^2/2)$ . Таким образом, мы ещё раз убеждаемся, что дискретный спектр возникает благодаря граничным условиям. Окончательно, спектр уровней энергии гармонического осциллятора имеет вид

$$E_N = \hbar\omega (N + 1/2), \quad N = 0, 1, 2, \dots$$

## 4.4. Операторный подход к решению уравнения Шредингера в осцилляторном потенциале

Существует изящный метод нахождения волновых функций и спектра уравнения Шредингера в осцилляторном потенциале без явного решения дифференциального уравнения. Введём операторы

$$\hat{a} = \frac{m\omega\hat{x} + i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \quad \hat{a}^+ = \frac{m\omega\hat{x} - i\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}.$$

Эти операторы обладают следующими свойствами:

$$[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1, \quad \hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + 1/2), \quad [\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega\hat{a}, \quad [\hat{H}, \hat{a}^+] = \hbar\omega\hat{a}^+. \quad (33)$$

Пусть  $\hat{H}\psi = E\psi$ . Подействуем гамильтонианом на функцию  $\hat{a}\psi$ , имеем:

$$\hat{H}(\hat{a}\psi) = ([\hat{H}, \hat{a}] + \hat{a}\hat{H})\psi = (E - \hbar\omega)(\hat{a}\psi).$$

Следовательно, функция  $\hat{a}\psi$  является собственной функцией гамильтониана с собственным значением  $E - \hbar\omega$ . Поэтому оператор  $\hat{a}$  называют понижающим оператором. Аналогично, функция  $\hat{a}^+\psi$  является собственной функцией гамильтониана с собственным значением  $E + \hbar\omega$ . Поэтому оператор  $\hat{a}^+$  называют повышающим оператором. Основное состояние определяется уравнением  $\hat{a}\psi_0 = 0$  или

$$\left(m\omega x + \hbar\frac{d}{dx}\right)\psi_0(x) = 0 \Rightarrow \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right).$$

Заметим, что  $\hat{H}\psi_0(x) = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + 1/2)\psi_0(x) = (\hbar\omega/2)\psi_0(x)$ , т. е. энергия  $E_0$  основного состояния  $\psi_0$  равна  $\hbar\omega/2$ .

Обозначим через  $\psi_n(x)$  состояние с энергией  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ . Так как  $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+\hat{a} + 1/2)$ , то

$$\hat{a}^+\hat{a}\psi_n = n\psi_n.$$

Умножив последнее равенство на  $\psi_n^*$  и проинтегрировав по  $x$ , получаем

$$\hat{a}\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}.$$

Аналогично,  $\hat{a}\hat{a}^+\psi_n = ([\hat{a}, \hat{a}^+] + \hat{a}^+\hat{a})\psi_n = (n + 1)\psi_n$ . Таким образом,

$$\hat{a}^+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1} \Rightarrow \psi_n = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}\psi_0.$$

Поскольку при замене  $x \rightarrow -x$  оператор  $\hat{a}^+$  переходит в оператор  $(-\hat{a}^+)$ , то  $\psi_n(-x) = (-1)^n\psi_n(x)$ . Используя связь

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^+ + \hat{a}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^+ - \hat{a}), \quad (34)$$

и приведённые выше формулы для действия операторов  $\hat{a}$  и  $\hat{a}^+$ , легко вычислить различные матричные элементы без использования явного вида волновых функций.

## 4.5. Когерентные состояния

Из (34) следует, что  $\langle n|\hat{x}|n\rangle = \langle n|\hat{p}|n\rangle = 0$ , т. е. средние значения координаты и импульса не зависят от времени и равны нулю для любой энергии, здесь  $|n\rangle$  отвечает волновой функции  $\psi_n(x)$ :  $\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$ . Это совершенно не похоже на гармонические колебания в осцилляторном потенциале. Для того, чтобы средняя координата и средний импульс зависели от времени так, как в классической механике, надо создать определённую суперпозицию состояний с разными энергиями. Это так называемые когерентные состояния, которые являются собственными функциями оператора  $\hat{a}$  с собственным значением  $\lambda$  (вообще говоря, комплексное число, так как  $\hat{a}$  не является эрмитовым оператором). Решая уравнение  $\hat{a}\psi = \lambda\psi$  и представляя  $\lambda = |\lambda|e^{i\phi}$ , получаем

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) = & \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \exp \left[ -\frac{m\omega}{2\hbar} \left( x - \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} |\lambda| \cos(\phi) \right)^2 + \right. \\ & \left. + i\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} |\lambda| \sin(\phi) x \right]. \end{aligned} \quad (35)$$

Для такой функции

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} |\lambda| \cos(\phi), \quad \langle p \rangle = \sqrt{2m\hbar\omega} |\lambda| \sin(\phi).$$

Для того, чтобы прояснить смысл параметра  $\lambda$  и найти  $\psi(x, t)$ , представим  $\psi(x, 0)$  в виде разложения  $\psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n$  по состояниям  $\psi_n$  с определённой энергией. Подставляя это разложение в уравнение на  $\psi(x, 0)$ , находим рекуррентное соотношение на коэффициенты:  $c_{n+1} = \lambda c_n / \sqrt{n+1}$ , следовательно,

$$c_n = \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} c_0, \quad c_0 = \exp(-|\lambda|^2/2), \quad \psi(x, 0) = c_0 \sum_n \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} \psi_n,$$

где  $c_0$  мы нашли из условия нормировки. Очевидно, что

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= c_0 \exp(-i\omega t/2) \sum_n \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} \exp(-in\omega t) \psi_n = \\ &= c_0 \exp(-i\omega t/2) \sum_n \frac{|\lambda|^n}{\sqrt{n!}} \exp[in(\phi - \omega t)] \psi_n \end{aligned} \quad (36)$$

Отсюда мы получаем, что  $\psi(x, t)$  получается из  $\psi(x, 0)$  умножением на  $e^{-i\omega t/2}$  и заменой  $\phi \rightarrow \phi - \omega t$ . Следовательно, среднее значение координаты и среднее значение импульса для когерентных состояний меняются по классическому закону:

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} |\lambda| \cos(\phi - \omega t), \quad \langle p \rangle = \sqrt{2m\omega\hbar} |\lambda| \sin(\phi - \omega t).$$

Рассмотрим теперь среднее значение  $n$  номера уровня энергии в когерентном состоянии  $\psi(x, t)$ :

$$\langle n \rangle = \sum_n n |c_n|^2 = \exp(-|\lambda|^2) \sum_n n \frac{|\lambda|^{2n}}{n!} = |\lambda|^2.$$

Этот результат проясняет смысл  $|\lambda|$ .

При рассмотрении соотношения неопределённостей мы выяснили, что для гауссовой формы волновой функции, которой соответствует волновая функция когерентного состояния,  $\Delta x \Delta p = \hbar/2$ .

## РАЗДЕЛ 5. ГЕЙЗЕНБЕРГОВСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

Формальное решение временного уравнения Шредингера с не зависящим от времени гамильтонианом  $\hat{H}$  можно записать в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp[-i\hat{H}t/\hbar] \Psi(\mathbf{r}, 0). \quad (37)$$

Поэтому, используя эрмитовость гамильтониана  $\hat{H}$ , среднее значение оператора  $\hat{A}$  в момент времени  $t$  можно записать в виде

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}, 0) \exp[i\hat{H}t/\hbar] \hat{A} \exp[-i\hat{H}t/\hbar] \Psi(\mathbf{r}, 0). \quad (38)$$

Введём гейзенберговский оператор  $\hat{A}_H(t)$ :

$$\hat{A}_H(t) = \exp[i\hat{H}t/\hbar] \hat{A} \exp[-i\hat{H}t/\hbar]. \quad (39)$$

Тогда среднее значение оператора  $\hat{A}$  в момент времени  $t$  равно

$$\langle \hat{A} \rangle = \int d^3r \Psi^*(\mathbf{r}, 0) \hat{A}_H(t) \Psi(\mathbf{r}, 0). \quad (40)$$

То есть, вместо того, чтобы искать зависимость от времени волновой функции, можно искать зависимость от времени гейзенберговского оператора, а затем усреднять его по начальной волновой функции. Запишем уравнение, которому удовлетворяет оператор  $\hat{A}_H(t)$  (уравнение Гейзенберга):

$$\frac{d}{dt} \hat{A}_H = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{A}_H] + \left( \frac{\partial}{\partial t} \hat{A} \right)_H. \quad (41)$$

Здесь мы учли возможную явную зависимость  $\hat{A}$  от времени и то, что  $\hat{H}_H = \hat{H}$ . Поскольку оператор временной эволюции  $\mathcal{U} = \exp[-i\hat{H}t/\hbar]$  является унитарным, т. е.  $\mathcal{U}^+ = \mathcal{U}^{-1}$ , то

$$\begin{aligned} (\hat{A} \hat{B})_H &= \mathcal{U}^{-1} \hat{A} \hat{B} \mathcal{U} = \mathcal{U}^{-1} \hat{A} \mathcal{U} \mathcal{U}^{-1} \hat{B} \mathcal{U} = \hat{A}_H \hat{B}_H, \\ [\hat{A}, \hat{B}]_H &= [\hat{A}_H, \hat{B}_H]. \end{aligned}$$

Аналитически уравнения Гейзенберга решаются редко, а численно их решать очень сложно, так как они написаны не на функции, а на операторы. Однако, если есть аналитическое решение уравнений Гейзенберга, то оно резко упрощает вычисление зависимости от времени различных средних значений.

Рассмотрим гамильтониан  $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) + U(\hat{x})$ . В этом случае уравнения Гейзенберга для операторов  $\hat{x}$  и  $\hat{p}$  имеют вид

$$\frac{d}{dt} \hat{x}_H = \frac{\hat{p}_H}{m}, \quad \frac{d}{dt} \hat{p}_H = -U'(\hat{x}_H).$$

По виду они похожи на классические уравнения, но содержат некоммутирующие операторы и в квадратурах не решаются, за исключением нескольких случаев. Если взять среднее от левых и правых частей этих уравнений по начальной волновой функции  $\Psi(x, 0)$ , то мы получим уравнения Эренфеста на средние значения  $\langle \hat{x} \rangle$  и  $\langle \hat{p} \rangle$ :

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m}, \quad \frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = -\langle U'(\hat{x}) \rangle.$$

Эти уравнения уже на функции, а не на операторы, но система не является замкнутой, так как  $\langle f(\hat{A}) \rangle \neq f(\langle \hat{A} \rangle)$ .

Рассмотрим несколько примеров.

### 1. Свободное движение.

Для  $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m)$  уравнения Гейзенберга имеют вид

$$\frac{d}{dt} \hat{x}_H = \frac{\hat{p}_H}{m}, \quad \frac{d}{dt} \hat{p}_H = 0. \quad (42)$$

Решение данных (операторных) уравнений с начальными условиями  $\hat{x}_H(0) = \hat{x}$  и  $\hat{p}_H(0) = \hat{p}$  имеет вид

$$\hat{p}_H = \hat{p}, \quad \hat{x}_H = \hat{x} + \frac{\hat{p}}{m} t.$$

Поэтому, для нахождения зависимости от времени среднего значения  $\hat{x}^2$  достаточно вычислить среднее от  $(\hat{x} + \hat{p}t/m)^2$  по начальной волновой функции.

### 2. Гармонический осциллятор.

Для  $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) + m\omega^2 \hat{x}^2/2$  уравнения Гейзенберга имеют вид

$$\frac{d}{dt} \hat{x}_H = \frac{\hat{p}_H}{m}, \quad \frac{d}{dt} \hat{p}_H = -m\omega^2 \hat{x}_H. \quad (43)$$

Решение этих уравнений с начальными условиями  $\hat{x}_H(0) = \hat{x}$ ,  $\hat{p}_H(0) = \hat{p}$  имеет следующий вид

$$\hat{p}_H(t) = -m\omega \hat{x} \sin(\omega t) + \hat{p} \cos(\omega t), \quad \hat{x}_H(t) = \hat{x} \cos(\omega t) + \frac{\hat{p}}{m\omega} \sin(\omega t).$$

Очевидно, используя эти формулы, легко вычислить любые средние по любой начальной функции, даже если она не раскладывается по собственным функциям гамильтониана в простом виде.

Шредингеровские операторы  $\hat{x}$  и  $\hat{p}$ , входящие в выражения для гейзенберговских операторов  $\hat{x}_H(t)$  и  $\hat{p}_H(t)$ , играют ту же роль, что начальные условия  $x(0) = x_0$  и  $p(0) = p_0$  в решениях  $x(t)$  и  $p(t)$  уравнений классической механики.

## РАЗДЕЛ 6. НЕПРЕРЫВНЫЙ СПЕКТР, ОДНОМЕРНОЕ РАССЕЙЯНИЕ

Рассмотрим потенциал  $U(x)$ , который стремится к нулю при  $|x| \rightarrow \infty$ , и частицу в этом потенциале с энергией  $E > 0$ . При больших  $|x|$  мы имеем свободное уравнение Шредингера  $-\hbar^2/(2m)\psi''(x) = E\psi$ , имеющее два решения  $\psi(x) = \exp(\pm ikx)$ , где  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ . Таким образом, мы имеем двукратное вырождение. Это вырождение имеет следующий смысл. В первом случае, волна падает из  $-\infty$ , частично отражается назад и частично проходит на  $+\infty$ . Во втором случае, волна падает из  $+\infty$ , частично отражается назад и частично проходит на  $-\infty$ . Таким образом, в первом случае мы решаем уравнение в потенциале  $U(x)$  с асимптотикой  $\exp(ikx) + A \exp(-ikx)$  на  $-\infty$  и  $B \exp(ikx)$  на  $+\infty$ . Вычислив ток при  $x \rightarrow -\infty$ , мы получим  $j = (\hbar k/m)(1 - |A|^2)$ , а при  $x \rightarrow +\infty$ , мы получим  $j = (\hbar k/m)|B|^2$ . Из сохранения тока следует, что

$$|A|^2 + |B|^2 = 1.$$

Ток для падающей волны  $\exp(ikx)$  равен  $j_0 = (\hbar k/m)$ , для отражённой волны  $A \exp(-ikx)$  равен  $j_R = -(\hbar k/m)|A|^2$ , и прошедшей волны  $B \exp(ikx)$  равен  $j_T = (\hbar k/m)|B|^2$ . Отношение  $R = |j_R|/j_0 = |A|^2$  называется коэффициентом отражения, а  $T = |j_T|/j_0 = |B|^2$  называется коэффициентом прохождения. Таким образом,  $R + T = 1$ , аналогично соотношению в оптике.

Пусть при  $x \rightarrow -\infty$  потенциал стремится к нулю, а при  $x \rightarrow +\infty$  потенциал стремится к  $U_0 \neq 0$ . Тогда волновой вектор на  $+\infty$  будет равен  $\kappa = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar$  для  $E > U_0$ , волновая функция при  $x \rightarrow +\infty$  будет  $B \exp(i\kappa x)$ , прошедший ток будет равен  $j_T = (\hbar \kappa/m)|B|^2$  и коэффициент прохождения будет  $(\kappa/k)|B|^2$ . По-прежнему будет выполняться соотношение  $R + T = 1$ . Если  $0 < E < U_0$ , то  $\kappa$  будет мнимой величиной, волновая функция при  $x \rightarrow +\infty$  будет экспоненциально затухать как  $\exp(-|\kappa|x)$ ,  $j_T = 0$  и  $j_R = j_0$ , т. е.  $T = 0$  и  $R = 1$ .

Пусть теперь волна падает справа налево, т. е. мы решаем уравнение Шредингера с асимптотикой  $\exp(-i\kappa x) + A_1 \exp(i\kappa x)$  при  $x \rightarrow +\infty$  и с асимптотикой  $B_1 \exp(-ikx)$  при  $x \rightarrow -\infty$ . Коэффициент прохождения будет  $T_1 = (k/\kappa)|B_1|^2$ , отражения  $R_1 = |A_1|^2$ , и выполняется соотношение  $R_1 + T_1 = 1$ . Как мы уже говорили выше, в случае вырождения выполняется соотношение  $\psi_1\psi_2' - \psi_1'\psi_2 = \text{const}$ . Используя асимптотики двух решений при  $x \rightarrow \pm\infty$ , получаем равенство  $k B_1 = \kappa B$ . В результате коэффициент прохождения равен  $T = (\kappa/k)|B|^2 = (k/\kappa)|B_1|^2 = T_1$ . Таким образом, коэффициент прохождения не зависит от того, падает волна слева направо или справа налево, хотя потенциал при этом не является симметричным,  $U(-x) \neq U(x)$ .

Рассмотрим несколько простых примеров задач рассеяния в одномерном случае.

1. **Ступенька:**  $U(x) = -U_0 \theta(x)$ ,  $U_0 > 0$ .

При  $x < 0$  решение имеет вид  $\exp(ikx) + A \exp(-ikx)$ , а при  $x > 0$  решение имеет вид  $B \exp(i\kappa x)$ ,  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ ,  $\kappa = \sqrt{2m(E + U_0)}/\hbar$ . Используя непрерывность волновой функции и производной, находим

$$A = \frac{k - \kappa}{k + \kappa}, \quad B = \frac{2k}{k + \kappa},$$

$$T = \frac{\kappa}{k} |B|^2 = \frac{4k\kappa}{(k + \kappa)^2}, \quad R = |A|^2 = \frac{(k - \kappa)^2}{(k + \kappa)^2}.$$

В классической механике в нашем потенциале отражение отсутствует, так что отражение в этой задаче — это чисто квантовый эффект, он называется надбарьерным отражением. Если при фиксированной энергии устремить  $U_0$  к бесконечности, то  $k/\kappa \rightarrow 0$ ,  $T \rightarrow 0$  и  $R \rightarrow 1$ . Таким образом, при резком скачке потенциала происходит сильное отражение — полная аналогия с оптикой, где при резком скачке показателя преломления происходит сильное отражение. Если при фиксированном  $U_0$  устремить  $E$  к бесконечности, то  $k/\kappa \rightarrow 1$ ,  $T \rightarrow 1$  и  $R \rightarrow 0$ .

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

При  $x < 0$  решение имеет вид  $\exp(ikx) + A \exp(-ikx)$ , а при  $x > 0$  решение  $B \exp(ikx)$ ,  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ . Используя непрерывность волновой функции и условие на скачок производной, находим

$$A = \frac{ig}{1 - ig}, \quad B = \frac{1}{1 - ig},$$

$$T = \frac{1}{1 + g^2}, \quad R = \frac{g^2}{1 + g^2}, \quad g = \frac{mG}{\hbar^2 k}.$$

Решение для потенциала  $U(x) = G \delta(x)$  получается из приведённых формул заменой  $g \rightarrow -G$ . При  $E \rightarrow \infty$  имеем  $g \rightarrow 0$ ,  $R \rightarrow 0$  и  $T \rightarrow 1$ . При  $G \rightarrow \infty$  имеем  $g \rightarrow \infty$ ,  $R \rightarrow 1$  и  $T \rightarrow 0$ , независимо от знака  $G$ .

Если мы перейдём в формуле для  $B$  от положительных энергий к отрицательным энергиям, так что  $k \rightarrow i\kappa$ , то при  $\kappa = mG/\hbar^2$  коэффициент при прошедшей волне стремится к бесконечности, т. е.  $B$  имеет полюс, соответствующий уровню энергии в яме  $E = -mG^2/(2\hbar^2)$ . Эта ситуация является общей: полюса в амплитуде прошедшей волны при вещественных энергиях  $E$  определяют уровни энергии локализованных состояний в потенциале  $U(x)$ .

3. **Яма конечной глубины:**  $U(x) = -U_0 \theta(x) \theta(a - x)$ ,  $U_0 > 0$ .

При  $x < 0$  решение имеет вид  $\exp(ikx) + A \exp(-ikx)$ , при  $0 < x < a$  решение имеет вид  $C \exp(i\kappa x) + D \exp(-i\kappa x)$ , а при  $x > a$  —  $B \exp(ikx)$ , где



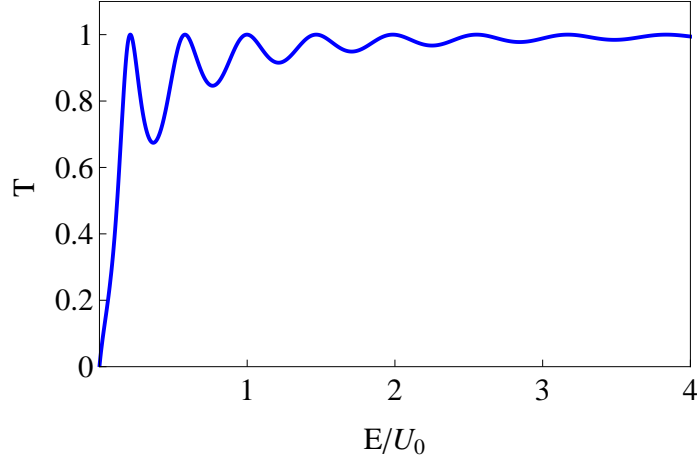


Рис. 3. Зависимость коэффициента прохождения  $T$  от отношения  $E/U_0$  для ямы конечной глубины при  $\sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2} = 20$

$k = \sqrt{2mE}/\hbar$  и  $\kappa = \sqrt{2m(E + U_0)}/\hbar$ . Используя непрерывность волновой функции и производной, получаем

$$\begin{aligned}
 A &= \frac{i(\kappa^2 - k^2) \sin(\kappa a)}{2\kappa k \cos(\kappa a) - i(\kappa^2 + k^2) \sin(\kappa a)}, \\
 B &= \frac{2\kappa k \exp(-ika)}{2\kappa k \cos(\kappa a) - i(\kappa^2 + k^2) \sin(\kappa a)}, \\
 T &= \frac{4\kappa^2 k^2}{4\kappa^2 k^2 + (\kappa^2 - k^2)^2 \sin^2(\kappa a)}, \\
 R &= \frac{(\kappa^2 - k^2)^2 \sin^2(\kappa a)}{4\kappa^2 k^2 + (\kappa^2 - k^2)^2 \sin^2(\kappa a)}.
 \end{aligned} \tag{44}$$

Типичная зависимость  $T$  от отношения  $E/U_0$  показана на рис. 3. При энергиях, соответствующих  $\kappa a = n\pi$ , коэффициент прохождения равен единице (прозрачность). При  $E \gg U_0$ , как и должно быть,  $T \rightarrow 1$ .

**Задача 6.1.** Сделаем замену  $E \rightarrow -|E|$  и приравняем знаменатель у  $B$  к нулю. Покажите, что получившееся уравнение эквивалентно двум уравнениям на дискретный спектр в яме конечной глубины в случае симметричного и антисимметричного решений.

4. **Барьер конечной высоты:**  $U(x) = U_0 \theta(x) \theta(a - x)$ ,  $U_0 > 0$ .

В этом случае решение для волновой функции получается из решения для предыдущего случая заменой  $U_0 \rightarrow -U_0$ . При  $E > U_0$  функции  $A$ ,  $B$ ,  $R$  и  $T$  получаются из (44) заменой  $U_0 \rightarrow -U_0$ , а при  $0 < E < U_0$  они имеют

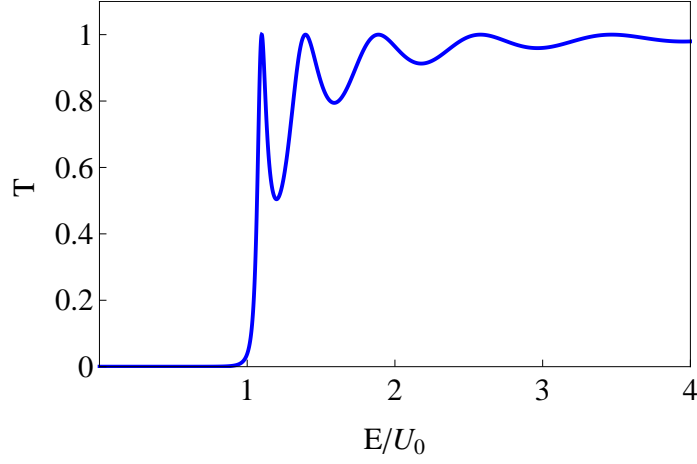


Рис. 4. Зависимость коэффициента прохождения  $T$  от отношения  $E/U_0$  для барьера конечной высоты при  $\sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2} = 10$

вид

$$\begin{aligned}
 A &= \frac{(q^2 + k^2) \sinh(qa)}{2iqk \cosh(qa) + (k^2 - q^2) \sinh(qa)}, \\
 B &= \frac{2iqk \exp(-ika)}{2iqk \cosh(qa) + (k^2 - q^2) \sinh(qa)}, \\
 T &= \frac{4q^2k^2}{4q^2k^2 + (q^2 + k^2)^2 \sinh^2(qa)}, \\
 R &= \frac{(q^2 + k^2)^2 \sinh^2(qa)}{4q^2k^2 + (q^2 + k^2)^2 \sinh^2(qa)},
 \end{aligned} \tag{45}$$

где  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  и  $q = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$ . Типичная зависимость  $T$  от отношения  $E/U_0$  показана на рис. 4. При  $E > U_0$ , см. (44) с заменой  $U_0 \rightarrow -U_0$ , в точках  $ka = n\pi$  коэффициент прохождения равен единице (прозрачность). При  $E \gg U_0$ , как и должно быть,  $T \rightarrow 1$ . При  $E < U_0$  коэффициент прохождения отличен от нуля за счёт туннелирования, и он экспоненциально мал.

## 5. Время задержки.

Мы рассмотрели коэффициенты прохождения и отражения при заданном волновом векторе  $k$  (заданном импульсе  $p = \hbar k$ ). Пользуясь линейностью уравнения Шредингера, создадим волновой пакет и будем следить за распространением центра пакета. Это означает, что в качестве падающей волны мы берём функцию

$$\begin{aligned}
 \psi_{in}(x, t) &= \int \frac{dk}{2\pi} f(k) \exp[-i\omega(k)t + ikx] \propto \delta(x - vt), \\
 v &= \omega'(k_0) = \frac{\hbar k_0}{m},
 \end{aligned}$$

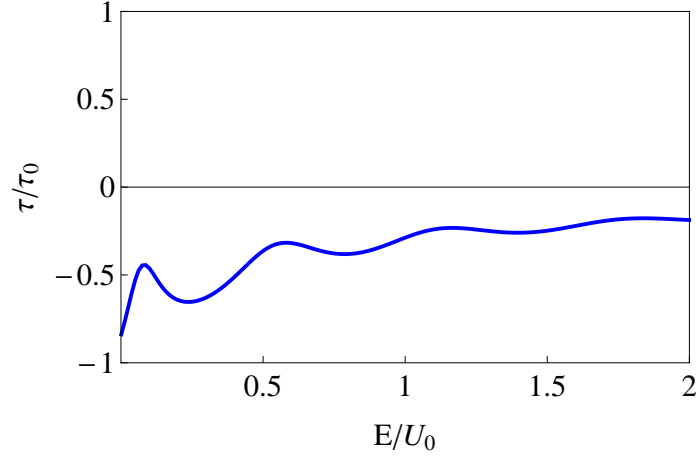


Рис. 5. Зависимость (46) отношения  $\tau/\tau_0$  от  $E/U_0$  для ямы конечной глубины при таких параметрах ямы, что  $\sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2} = 20$

где  $f(k)$  — плавная функция с максимумом в точке  $k_0$ ,  $v$  — скорость частицы. Записав амплитуду прошедшей волны в виде

$$B(k) = |B(k)| \exp[i\varphi(k)]$$

и представив  $\varphi(k) \approx \varphi(k_0) + (k - k_0)\varphi'(k_0)$ , получаем

$$\psi_{out}(x, t) = \int \frac{dk}{2\pi} f(k) |B(k)| e^{-i\omega(k)t + ikx + i\varphi(k)} \propto \delta(x - v(t - \tau)),$$

$$\tau = \frac{1}{v} \varphi'(k_0).$$

Функция  $\tau(k)$  называется временем задержки. Для потенциала в форме прямоугольной ямы,  $U(x) = -U_0 \theta(x) \theta(a - x)$ , время задержки равно

$$\tau = -\frac{\tau_0 Z}{1 + \left(\frac{\varkappa^2 - k^2}{2k\varkappa}\right)^2 \sin^2(\varkappa a)}, \quad \tau_0 = \frac{a}{v},$$

$$Z = \frac{\varkappa^2 - k^2}{2\varkappa^2} + \left(\frac{\varkappa^2 - k^2}{2k\varkappa}\right)^2 \left[ \sin^2(\varkappa a) + \frac{\sin(2\varkappa a)}{\varkappa a} \right],$$
(46)

где  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  и  $\varkappa = \sqrt{2m(E + U_0)}/\hbar$ . Типичный график зависимости  $\tau/\tau_0$  от  $E/U_0$  показан на рис. 5. Время задержки отрицательно, что связано с тем, что частица быстрее проскакивает область действия потенциала в случае притяжения, и  $|\tau/\tau_0| \sim 1$ . Однако при  $\sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2} \approx n\pi$  время задержки становится большим по модулю при малых энергиях и может менять знак: см. рис. 6. Это связано с тем, что при  $\sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2} = n\pi$  возникает уровень в яме с энергией равной нулю.

Рассмотрим барьер  $U(x) = U_0 \theta(x) \theta(a - x)$ . Для  $E > U_0$  время задержки определяется формулой (46) с заменой  $U_0 \rightarrow -U_0$ , а при  $0 < E < U_0$  время

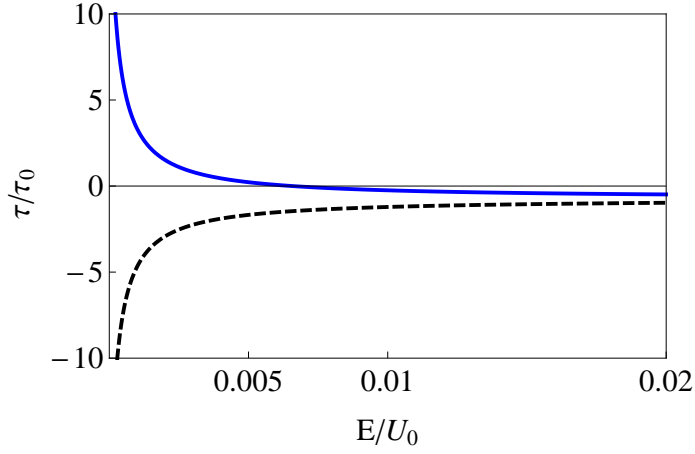


Рис. 6. Зависимость (46) отношения  $\tau/\tau_0$  от  $E/U_0$  для  $\sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2} = 0.99\pi$  (сплошная линия) и  $\sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2} = 1.01\pi$  (пунктир)

задержки равно

$$\tau = -\frac{\tau_0 Z}{1 + \left(\frac{q^2 + k^2}{2kq}\right)^2 \sinh^2(qa)}, \quad \tau_0 = \frac{a}{v}, \quad (47)$$

$$Z = \frac{q^2 + k^2}{2q^2} + \left(\frac{q^2 + k^2}{2kq}\right)^2 \left[ \sinh^2(qa) - \frac{\sinh(2qa)}{qa} \right],$$

где  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  и  $q = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$ . Зависимость  $\tau/\tau_0$  от  $E/|U_0|$  показана на рис. 7.

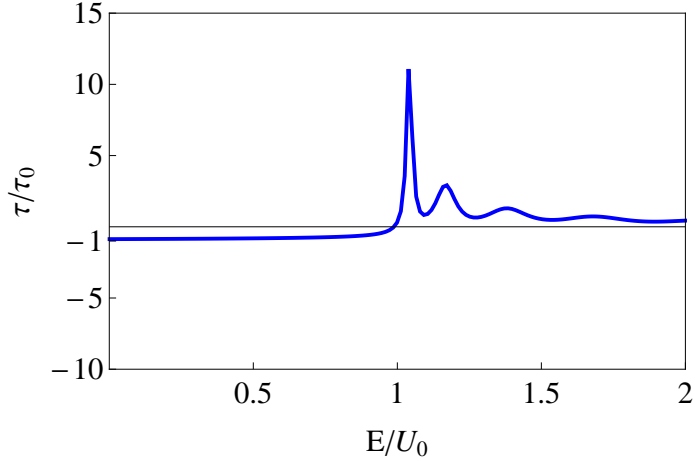


Рис. 7. Зависимость (47) отношения  $\tau/\tau_0$  от  $E/U_0$  для барьера конечной высоты при  $\sqrt{2mU_0a^2/\hbar^2} = 15$

Хорошо видны надбарьерные резонансы. Интересно, что для высокого барьера ( $U_0 \gg \hbar^2/(ma^2)$ ) при  $E < U_0$  время задержки отрицательное и стремится к  $-\tau_0$ , т. е. под барьером частица проскакивает мгновенно!

## РАЗДЕЛ 7. КВАЗИСТАЦИОНАРНЫЕ СОСТОЯНИЯ

Будем рассматривать энергию  $E$  как комплексную переменную и посмотрим, при каких энергиях время задержки обращается в бесконечность. Для потенциала  $U(x) = -U_0 \theta(x) \theta(a - x)$ , получаем уравнение

$$1 + \left( \frac{\varkappa^2 - k^2}{2k\varkappa} \right)^2 \sin^2(\varkappa a) = 0, \quad (48)$$

где  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  и  $\varkappa = \sqrt{2m(E + U_0)}/\hbar$ . При отрицательных энергиях мы заменяем  $k \rightarrow i\sqrt{2m|E|}/\hbar$ ,  $\varkappa \rightarrow \sqrt{2m(U_0 - |E|)}/\hbar$ , и уравнение приобретает вид

$$\frac{1}{4y(1-y)} \sin^2(g\sqrt{1-y}) = 1, \quad (49)$$

$$g = \sqrt{2ma^2U_0}/\hbar, \quad y = |E|/U_0.$$

В этом уравнении содержатся уравнения на уровни энергии (чётные и нечётные) в яме, см. (30) и (32).

Рассмотрим теперь барьер  $U(x) = U_0 \theta(x) \theta(a - x)$ . Время задержки обращается в бесконечность, если

$$1 + \frac{U_0^2}{4E(E - U_0)} \sin^2 \left( \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}(E - U_0)} \right) = 0. \quad (50)$$

У этого уравнения есть решения при комплексной энергии с положительной реальной частью и отрицательной мнимой частью. Рассмотрим случай  $g = \sqrt{2ma^2U_0}/\hbar \gg 1$ . Решения существуют при  $|E - U_0| \ll U_0$ , если

$$\sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2}(E - U_0)} = n\pi - i\varepsilon, \quad \varepsilon \ll 1.$$

Из уравнения находим  $\varepsilon = 2n\pi/g$ . Таким образом,

$$E_n = U_0 + \frac{\hbar^2(n\pi)^2}{2ma^2} \left( 1 - \frac{4i}{g} \right) = \text{Re } E_n - i \frac{\Gamma_n}{2}, \quad (51)$$

$$\text{Re } E_n = U_0 + \frac{\hbar^2(n\pi)^2}{2ma^2}, \quad \Gamma_n = \frac{4\hbar^2(n\pi)^2}{ma^2 g}.$$

Обсудим физический смысл полученных решений. Мы уже говорили, что на большом скачке потенциала происходит сильное отражение. Если мы, при  $t = 0$ , локализуем над ступенькой волновой пакет, то из-за сильного отражения он будет жить над ступенькой долго, прежде чем расплывётся. В нулевом приближении можно считать, что на границах ступеньки находятся

бесконечные стенки и кинетическая энергия равна  $\mathcal{E}_n = \frac{\hbar^2(n\pi)^2}{2ma^2}$ , а полная энергия равна  $U_0 + \mathcal{E}_n = \text{Re } E_n$ . Обсудим теперь смысл  $\Gamma_n$ . Зависимость от времени волновой функции

$$\psi \propto \exp(-iE_n t/\hbar) = \exp(-i\text{Re } E_n t/\hbar - \Gamma_n t/(2\hbar)) .$$

Поэтому  $|\psi|^2 \propto \exp(-\Gamma_n t/\hbar)$ . Мы видим, что нормировка волновой функции убывает с характерным временем  $t_0 = \hbar/\Gamma$ . Комплексная энергия используется для приближённого описания долгоживущих квазистационарных состояний. Если характерное время жизни такого состояния  $t_0$ , то испущенные волны имеют, согласно соотношению неопределённостей, разброс частот  $\Delta\omega \sim 1/t_0$  и соответствующий разброс энергий  $\Delta E \sim \hbar/t_0 = \Gamma$ . Если считать вероятность распада в единицу времени  $\dot{W}$  не зависящей от времени и написать уравнение для изменения числа частиц  $\dot{N} = -\dot{W}N$ , имеющее решение  $N(t) = N(0) \exp(-\dot{W} t)$ , то

$$\dot{W} = \frac{1}{t_0} = \frac{\Gamma}{\hbar} .$$

Экспоненциальный закон распада имеет ограниченную область применимости по времени — он не справедлив на очень маленьких временах и на очень больших временах. Кроме того, необходимо, чтобы расстояние между соседними уровнями было больше, чем ширина каждого уровня, т. е.

$$\text{Re } E_{n+1} - \text{Re } E_n \gg \Gamma_n ,$$

иначе уровни перекрываются. В нашей задаче указанное условие эквивалентно условию  $n \ll g$ . Именно поэтому квазистационарные состояния существуют при  $g \gg 1$ .

Чтобы оценить  $\Gamma_n$ , оценим сначала  $\dot{W}$ :

$$\begin{aligned} \dot{W} &\sim \frac{1}{t} 2T, \quad t = \frac{2a}{\bar{v}}, \\ \frac{m\bar{v}^2}{2} &= \mathcal{E}_n = \frac{\hbar^2(n\pi)^2}{2ma^2}, \quad T \approx \frac{4k}{\varkappa} = 4\sqrt{\frac{\mathcal{E}_n}{U_0}}, \\ \dot{W} &= \frac{4\hbar(n\pi)^2}{ma^2 g}, \quad \Gamma_n = \hbar\dot{W} = \frac{4\hbar^2(n\pi)^2}{ma^2 g}. \end{aligned} \quad (52)$$

Здесь  $k = \sqrt{2m\mathcal{E}_n}/\hbar$ ,  $\varkappa = \sqrt{2m(\mathcal{E}_n + U_0)}/\hbar$ ,  $\bar{v}$  — характерная скорость и  $T$  — коэффициент прохождения в задаче о ступеньке в случае  $\varkappa \gg k$ .

Последовательный подход к описанию квазистационарных состояний состоит в следующем. Следуя картине распада, ищем нефизические решения уравнения Шредингера с асимптотикой на бесконечности, содержащей только расходящуюся волну. Для вещественных энергий таких решений нет. При этом уравнение на уровни энергий квазистационарных состояний будет иметь дискретный спектр комплексных решений.

Рассмотрим симметричные квазистационарные состояния в потенциале  $U(x) = U_0 \theta(a/2 - |x|)$ . Решение записываем в следующем виде

$$\begin{aligned} \psi &= \exp(-ikx) \quad \text{при} \quad -\infty < x < -a/2, \\ \psi &= C \cos(\kappa x) \quad \text{при} \quad -a/2 < x < a/2, \\ \psi &= \exp(ikx) \quad \text{при} \quad a/2 < x < \infty, \end{aligned} \quad (53)$$

где  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  и  $\kappa = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar$ . Используя непрерывность волновой функции и её производной в точке  $x = a/2$  (после этого в точке  $x = -a/2$  условия непрерывности будут выполняться автоматически), получаем уравнение на уровни энергий:

$$\operatorname{tg} \left( \frac{\kappa a}{2} \right) = -i \frac{k}{\kappa}.$$

Очевидно, это уравнение не имеет решений для действительной энергии. Введём переменную  $y = \kappa a/2$  и запишем уравнение в виде

$$\operatorname{tg} y = -i \frac{\sqrt{g^2 + 4y^2}}{2y}, \quad g = \sqrt{2ma^2 U_0/\hbar^2} \gg 1.$$

Решение этого уравнения при  $g \gg 1$  имеет вид

$$y = \pi(n + 1/2)(1 - 2i/g).$$

То есть

$$E_n = U_0 + \frac{\hbar^2 \pi^2 (2n + 1)^2}{2ma^2} \left( 1 - \frac{4i}{g} \right). \quad (54)$$

Для антисимметричных квазистационарных состояний решение записываем в виде

$$\begin{aligned} \psi &= -\exp(-ikx) \quad \text{при} \quad -\infty < x < -a/2, \\ \psi &= C \sin(\kappa x) \quad \text{при} \quad -a/2 < x < a/2, \\ \psi &= \exp(ikx) \quad \text{при} \quad a/2 < x < \infty. \end{aligned} \quad (55)$$

Используя непрерывность волновой функции и её производной в точке  $x = a/2$ , получаем уравнение на уровни энергий:

$$\operatorname{ctg} \left( \frac{\kappa a}{2} \right) = i \frac{k}{\kappa}.$$

Введя переменную  $y = \kappa a/2$ , запишем уравнение в виде

$$\operatorname{ctg} y = i \frac{\sqrt{g^2 + 4y^2}}{2y}.$$

Решение этого уравнения при  $g \gg 1$  имеет вид

$$y = \pi n (1 - 2i/g).$$

То есть

$$E_n = U_0 + \frac{\hbar^2 \pi^2 (2n)^2}{2ma^2} \left(1 - \frac{4i}{g}\right). \quad (56)$$

Совокупность симметричного и антисимметричного решений совпадает со спектром квазистационарных состояний, полученным другим способом.



## РАЗДЕЛ 8. ПЕРИОДИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ. ОПЕРАТОР СДВИГА. ТЕОРЕМА БЛОХА

Представим произвольную функцию  $\psi(x)$  в виде разложения в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned}\psi(x+a) &= \sum_n \frac{a^n}{n!} \psi^{(n)}(x) = \sum_n \frac{1}{n!} \left( a \frac{d}{dx} \right)^n \psi(x) = \\ &= \exp \left[ a \frac{d}{dx} \right] \psi(x) = \exp[ia \hat{p}/\hbar] \psi(x).\end{aligned}\tag{57}$$

Поэтому унитарный оператор  $\hat{T}_a = \exp[ia \hat{p}/\hbar]$  называют оператором сдвига на расстояние  $a$ ,  $\hat{T}_a \psi(x) = \psi(x+a)$ . Покажем, что  $\hat{T}_a U(\hat{x}) \hat{T}_a^{-1} = U(\hat{x}+a)$ . Действительно, для произвольной функции  $\psi(x)$  имеем

$$[\hat{T}_a U(\hat{x}) \hat{T}_a^{-1}] \psi(x) = \hat{T}_a U(x) \psi(x-a) = U(x+a) \psi(x).$$

Рассмотрим частицу в периодическом потенциале с периодом  $a$ , т. е. потенциал удовлетворяет условию  $U(x+a) = U(x)$ . Так как  $\hat{p}$  коммутирует с  $\hat{T}_a$ , то

$$\hat{T}_a \hat{H} \hat{T}_a^{-1} = \hat{H} \Rightarrow \hat{T}_a \hat{H} = \hat{H} \hat{T}_a \Rightarrow [\hat{T}_a, \hat{H}] = 0.$$

Так как гамильтониан коммутирует с оператором трансляции, то волновую функцию можно выбрать одновременно собственной и  $\hat{H}$ , и  $\hat{T}_a$ , т. е.  $\hat{H} \psi = E \psi$ ,  $\hat{T}_a \psi = \lambda \psi$ . Собственные значения унитарного оператора равны по модулю единице:  $\lambda = \exp(i\theta)$ . Поэтому  $\psi(x+a) = \exp(i\theta) \psi(x)$ . Представим  $\theta$  и  $\psi$  в виде

$$\theta = qa/\hbar, \quad \psi(x) = \exp[iqx/\hbar] u_q(x).$$

Тогда  $u_q(x+a) = u_q(x)$ , т. е.  $u_q(x)$  является периодической функцией с периодом  $a$ . Утверждение о том, что волновую функцию состояния с определенной энергией в периодическом потенциале можно представить в виде произведения плоской волны и периодической функции, называется теоремой Блоха. Величина  $q$  называется квазиимпульсом. Можно считать, что  $-\pi/a < q/\hbar < \pi/a$ . Решению с положительным  $q$  отвечает волна, бегущая слева направо, а с отрицательным  $q$  отвечает волна, бегущая справа налево. Одной из важных задач физики твёрдого тела является нахождение зависимости энергии  $E$  от квазиимпульса  $q$ .

Обсудим свойства спектра с  $E < 0$  в периодическом потенциале на примере «решётки Дирака»

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

Согласно теореме Блоха, запишем решение в интервале  $na < x < (n+1)a$  в виде

$$\psi_n = \exp[in\theta] \left\{ A \exp[\kappa(x - na)] + B \exp[\kappa(na - x)] \right\},$$

а в интервале  $(n+1)a < x < (n+2)a$  в виде

$$\psi_{n+1} = \exp[i(n+1)\theta] \left\{ A \exp[\kappa(x - na - a)] + B \exp[\kappa(na + a - x)] \right\},$$

где  $\kappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ . Используя непрерывность волновой функции и условие на скачок производной в точке  $x = (n+1)a$ , получаем

$$\cosh(\kappa a) = g \frac{\sinh(\kappa a)}{\kappa a} + \cos \theta, \quad g = \frac{mGa}{\hbar^2}.$$

Для  $g \gg 1$  решение существует только при  $\kappa \gg 1$ . Заменяя  $\cosh(\kappa a)$  и  $\sinh(\kappa a)$  на  $\exp(\kappa a)/2$ , находим

$$\kappa = \frac{g}{a} (1 + 2e^{-g} \cos \theta), \quad E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{mG^2}{2\hbar^2} (1 + 4e^{-g} \cos \theta).$$

В этом выражении  $\theta = qa/\hbar$  меняется в интервале  $-\pi < \theta < \pi$ . Таким образом, мы получили непрерывный спектр энергии при  $E < 0$  в узкой полосе (зоне) вблизи  $E_0 = -\frac{mG^2}{2\hbar^2}$  (энергия стационарного состояния в  $\delta$ -яме) и шириной

$$\Delta E = \frac{4mG^2}{\hbar^2} e^{-g}.$$

Непрерывность спектра связана с бесконечным числом ям. Если число ям конечно и равно  $N$ , то при  $g \gg 1$  будет ровно  $N$  уровней, расположенных в интервале  $\Delta E$ .

**Задача 8.1.** Покажите, что в случае  $N$  ям уровни энергии будут

$$E_l = -\frac{mG^2}{2\hbar^2} \left[ 1 + 4e^{-g} \cos \left( \frac{l\pi}{N+1} \right) \right], \quad l = 1, 2, \dots, N.$$

Указание: возьмите суперпозицию волны, бегущей направо и волны, бегущей налево, и потребуйте, чтобы при  $x < 0$  и при  $x > (N-1)a$  были только затухающие экспоненты.

В случае конечного числа ям при  $E < 0$  волновая функция вещественная и ток равен нулю. Однако в случае бесконечного числа ям ток не равен нулю.

**Задача 8.2.** Покажите, что в случае бесконечного числа ям при  $g \gg 1$  в разрешённой зоне ток равен

$$j = \frac{2\hbar\kappa}{m} |AB| \sin \theta,$$

где  $\theta = qa/\hbar$  и  $q$  — квазиимпульс.

Обсудим спектр с  $E > 0$  в периодическом потенциале

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

Уравнение на спектр имеет вид

$$\begin{aligned} \cos(ka) &= -g \frac{\sin(ka)}{ka} + \cos \theta, \\ g &= \frac{mGa}{\hbar^2}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \end{aligned} \tag{58}$$

Для  $g \gg 1$  получаем решение

$$\begin{aligned} ka &= n\pi \left\{ 1 - \frac{1}{g} [1 - (-1)^n \cos \theta] \right\}, \quad n \ll g, \\ E &= \frac{\hbar^2 (n\pi)^2}{2ma^2} \left\{ 1 - \frac{2}{g} [1 - (-1)^n \cos \theta] \right\}. \end{aligned} \tag{59}$$

Мы получили удивительный результат: наличие бесконечного числа разрешённых и запрещённых зон при  $E > 0$ , хотя при любом конечном числе ям  $N$  спектр является непрерывным. В нашем приближенном решении (59) зоны начинают перекрываться, когда  $n \gtrsim g$ . При конечном  $N$  коэффициент прохождения сильно зависит от энергии, и в пределе  $N \rightarrow \infty$  коэффициент прохождения стремится к нулю в области, соответствующей запрещённой зоне.

## РАЗДЕЛ 9. ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ГАЛИЛЕЯ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Предположим, что мы знаем стационарное решение  $\Psi_0(\mathbf{r})$  уравнения Шредингера в потенциале  $U(\mathbf{r})$ , отвечающее энергии  $E_0$ . Мы перешли в движущуюся систему отсчёта, в которой яма движется с постоянной скоростью  $\mathbf{v}$ . Мы хотим выразить решение  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  уравнения

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[ \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + U(\mathbf{r} - \mathbf{v}t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t)$$

через  $\Psi_0(\mathbf{r})$  (преобразование Галилея для уравнения Шредингера). Очевидно, что вероятность найти частицу в какой-то точке зависит от расстояния от этой точки до ямы и не зависит от системы отсчёта, т. е.  $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\Psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)|^2$ . Следовательно функции  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  и  $\Psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)$  отличаются только фазой. Легко проверить, что

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[ - \left( \frac{m v^2}{2} + E_0 \right) t + m \mathbf{v} \cdot \mathbf{r} \right] \right\} \Psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{v}t).$$

Отсюда видно, что  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  не отвечает состоянию с определённой энергией, так как не зависит от времени как  $\exp(-iEt/\hbar)$  за счёт зависимости от времени в  $\Psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{v}t)$ . Заметим, что этот эффект не является квантовым и существует также в классической механике. Если представить себе классическую частицу внутри прямоугольной ямы, движущейся со скоростью  $u$ , то скорость частицы будет зависеть от направления скорости частицы в яме. Если скорость частицы параллельна скорости ямы и равна  $v > u$ , то после соударения со стенкой ямы частица будет иметь скорость, равную  $2u - v \neq -v$ .

## РАЗДЕЛ 10. УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ

### 10.1. Классическая механика в электромагнитном поле

В классической электродинамике функция Лагранжа нерелятивистской частицы с зарядом  $e$  и скоростью  $\mathbf{v}$ , движущейся в электромагнитном поле, которое описывается 4-х потенциалом  $A^\mu(\mathbf{r}, t) = (\varphi(\mathbf{r}, t), \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))$ , имеет вид

$$L = \frac{m\mathbf{v}^2}{2} - e\varphi(\mathbf{r}, t) + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{v}.$$

Канонический импульс, отвечающий этой функции Лагранжа, равен

$$\mathbf{p} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}} L = m\mathbf{v} + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t).$$

Таким образом, скорость частицы связана с каноническим импульсом соотношением

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{m}.$$

Энергия частицы равна

$$E = \mathbf{p} \cdot \mathbf{v} - L = \frac{m\mathbf{v}^2}{2} + e\varphi.$$

Гамильтониан системы — это энергия, выраженная через канонический импульс и координату:

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

Электрическое поле и магнитное поле выражаются через потенциалы следующим образом

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad \mathcal{H} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t).$$

Эти выражения инвариантны при калибровочном преобразовании вида

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}f(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) + \nabla f(\mathbf{r}, t), \quad (60)$$

где  $f(\mathbf{r}, t)$  — произвольная функция.

Уравнение движения в классической механике содержит только электрическое и магнитное поле и не содержит потенциалы  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  и  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ :

$$m\frac{d}{dt}\mathbf{v} = e\mathbf{E} + \frac{e}{c}\mathbf{v} \times \mathcal{H}.$$

## Выводы

1. Измерять можно только калибровочно-инвариантные величины. Потенциал  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  не является калибровочно-инвариантным. Поэтому можно измерить скорость  $\mathbf{v}$ , но нельзя измерить канонический импульс!
2. Потенциал  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  не является калибровочно-инвариантным. Поэтому нельзя измерить гамильтониан  $H$ ! Представим себе частицу, движущуюся в не зависящем от времени электрическом поле  $\mathcal{E}$ , описываемом потенциалом  $\varphi(\mathbf{r})$ , т. е.  $\mathcal{E} = -\nabla \varphi(\mathbf{r})$  и  $H = \mathbf{p}^2/(2m) + e\varphi(\mathbf{r})$ . Так как гамильтониан не зависит от времени, то, очевидно, энергия сохраняется. Перейдём теперь к калибровке  $\varphi(\mathbf{r}, t) = 0$ . В этой калибровке появится зависящий от времени вектор-потенциал  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ , и гамильтониан станет зависящим от времени:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = -c\mathcal{E}t, \quad H = \frac{(\mathbf{p} + e\mathcal{E}t)^2}{2m}.$$

Гамильтониан стал зависеть от времени, но это не означает, что энергия не сохраняется. Как уже говорилось, гамильтониан, в отличие от энергии, не является калибровочно-инвариантной величиной.

3. Энергию частицы в электромагнитном поле можно написать в калибровочно-инвариантном виде:

$$E = \frac{m\mathbf{v}^2}{2} + \int d^3r \frac{\mathcal{E}_{tot}^2 + \mathcal{H}_{tot}^2}{8\pi},$$

где  $\mathcal{E}_{tot}$  ( $\mathcal{H}_{tot}$ ) — сумма внешнего электрического поля  $\mathcal{E}_{ex}$  и электрического поля частицы  $\mathcal{E}_p$  (внешнего магнитного поля  $\mathcal{H}_{ex}$  и магнитного поля частицы). Выполнение закона сохранения суммарной энергии частицы и поля при перемещении частицы связано с учетом интерференции внешнего поля и поля частицы. Для прояснения этого утверждения рассмотрим следующий пример.

Пусть частица с зарядом  $e_1$  находится в кулоновском поле частицы с зарядом  $e_2$ ,  $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2 = \mathbf{R}$ . Выберем  $\mathbf{r}_2 = 0$ , тогда  $\mathcal{E}_{ex}(\mathbf{r}) = e_2\mathbf{r}/r^3$ ,  $\mathcal{E}_p(\mathbf{r}) = e_1(\mathbf{r} - \mathbf{R})/|\mathbf{r} - \mathbf{R}|^3$ , тогда

$$\begin{aligned} \int d^3r \frac{\mathcal{E}_p \cdot \mathcal{E}_{ex}}{4\pi} &= \frac{e_1e_2}{4\pi} \int d^3r \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R})}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|^3} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r^3} = \\ &= \frac{e_1e_2}{4\pi} \int d^3r \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R})}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|^3} \cdot \left(-\nabla \frac{1}{r}\right) = \frac{e_1e_2}{4\pi} \int d^3r \frac{1}{r} \operatorname{div} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{R})}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|^3} = \\ &= e_1e_2 \int d^3r \frac{1}{r} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \frac{e_1e_2}{R}. \end{aligned}$$

Таким образом, мы воспроизвели кулоновский потенциал.

**Задача 10.1.** Рассмотрим частицу с зарядом  $e$  в плоском конденсаторе с электрическим полем  $\mathcal{E}_0$  между пластинами. Направим ось  $z$  вдоль поля. Как известно, закон сохранения энергии частицы имеет вид

$$mv^2/2 - e\mathcal{E}_0z = \text{const}.$$

Покажите, что потенциальная энергия равна

$$U(z) = \int_V d^3r \frac{\mathcal{E}_p \cdot \mathcal{E}_0}{4\pi},$$

где интеграл берётся по области внутри конденсатора и  $\mathcal{E}_p$  — кулоновское поле частицы, за начало координат выбран центр конденсатора.

## 10.2. Квантовая механика в электромагнитном поле

Естественно ожидать, что оператор Гамильтона и соответствующее уравнение Шредингера для частицы в электромагнитном поле имеют вид

$$\hat{H} = \frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\right)^2}{2m} + e\varphi(\mathbf{r}, t), \quad i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t). \quad (61)$$

Следствием этих формул по-прежнему является уравнение непрерывности

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}\rho(\mathbf{r}, t) + \text{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= 0, \\ \rho(\mathbf{r}, t) &= |\psi(\mathbf{r}, t)|^2, \\ \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{2} \left\{ \psi^*(\mathbf{r}, t) [\hat{\mathbf{v}} \psi(\mathbf{r}, t)] + [\hat{\mathbf{v}} \psi(\mathbf{r}, t)]^* \psi(\mathbf{r}, t) \right\}, \\ \hat{\mathbf{v}} &= \frac{\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{m}. \end{aligned} \quad (62)$$

Операторы плотности числа частиц  $\hat{\rho}_{\mathbf{X}}$  и плотности тока  $\hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{X}}$ , средние от которых совпадают с  $\rho(\mathbf{X}, t)$  и  $\mathbf{j}(\mathbf{X}, t)$ , равны

$$\hat{\rho}_{\mathbf{X}} = \delta(\mathbf{X} - \mathbf{r}), \quad \hat{\mathbf{j}}_{\mathbf{X}} = \frac{1}{2} [\hat{\mathbf{v}} \hat{\rho}_{\mathbf{X}} + \hat{\rho}_{\mathbf{X}} \hat{\mathbf{v}}].$$

В квантовой механике различные компоненты скорости частицы в магнитном поле между собой не коммутируют:

$$[\hat{v}_i, \hat{v}_j] = \frac{1}{m^2} \left[ \hat{p}_i - \frac{e}{c}A_i, \hat{p}_j - \frac{e}{c}A_j \right] = \frac{ie\hbar}{m^2c} \left[ \frac{\partial}{\partial x^i} A_j - \frac{\partial}{\partial x^j} A_i \right] = \frac{ie\hbar}{m^2c} \epsilon_{ijk} \mathcal{H}^k.$$

Следовательно, если магнитное поле направлено по оси  $z$ , то существует соотношение неопределённостей между компонентами скорости  $v_x$  и  $v_y$ .

Обсудим калибровочную инвариантность уравнения Шредингера. Если сделать одновременную замену компонент потенциала  $A^\mu$  и волновой функции  $\psi(\mathbf{r}, t)$

$$\begin{aligned}\varphi(\mathbf{r}, t) &= \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} f(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) + \nabla f(\mathbf{r}, t), \\ \psi(\mathbf{r}, t) &= \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} f(\mathbf{r}, t)\right) \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t),\end{aligned}\tag{63}$$

то уравнение Шредингера на функцию  $\psi(\mathbf{r}, t)$  с 4-х потенциалом  $A(\mathbf{r}, t)$  перейдёт в уравнение Шредингера на функцию  $\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t)$  с 4-х потенциалом  $\tilde{A}(\mathbf{r}, t)$ . При этом плотность числа частиц и плотность тока сохраняют свой вид. Таким образом, вычисления можно производить в любой калибровке, которая удобна для данной задачи.

### 10.3. Движение заряженной частицы в однородном магнитном поле, уровни Ландау

Рассмотрим уравнение Шредингера в однородном, не зависящем от времени магнитном поле  $\mathcal{H}$ , направленном вдоль оси  $z$ . В отличие от классической механики, уравнение Шредингера не может быть выражено только через электрические и магнитные поля. Оно содержит 4-х потенциал, что приводит к наблюдаемым эффектам, которые отсутствуют в классической электродинамике (так называемый эффект Ааронова — Бома, который мы обсудим позже). В силу калибровочной инвариантности, конкретный вид потенциала может быть выбран разный. Рассмотрим сначала калибровку  $A_y = \mathcal{H}x$ , в которой стационарное уравнение Шредингера имеет вид

$$\left[ \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\left(\hat{p}_y - \frac{e}{c} \mathcal{H}x\right)^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} \right] \psi_1(\mathbf{r}) = E \psi_1(\mathbf{r}).$$

Так как явной зависимости от  $y$  и  $z$  нет, то решение можно искать в виде

$$\psi_1(\mathbf{r}) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(q_y y + q_z z)\right] \Psi_1(x).$$

Получаем:

$$\begin{aligned}\left[ \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2(x - x_0)^2}{2} \right] \Psi_1(x) &= \varepsilon \Psi_1(x), \\ \omega &= \frac{e\mathcal{H}}{mc}, \quad x_0 = \frac{c q_y}{e\mathcal{H}}, \quad \varepsilon = E - \frac{q_z^2}{2m}.\end{aligned}\tag{64}$$



Мы имеем гармонический осциллятор со сдвинутым началом отсчёта, т. е.

$$E = \frac{q_z^2}{2m} + \hbar\omega (n + 1/2), \quad \Psi_1(x) = \chi_n(x - x_0),$$

где  $\chi_n(x)$  — волновая функция  $n$ -го уровня гармонического осциллятора. Для определенности здесь и ниже мы считаем  $e > 0$ . Свойства полученных решений, соответствующих так называемым уровням Ландау, следующие.

1. Энергия  $E$  не зависит от импульса  $q_y$ .
2. Среднее значение оператора канонического импульса  $\hat{p}_y$  не равно нулю, а среднее значение  $\hat{v}_y$  равно нулю.
3.  $|\psi(\mathbf{r})| = |\chi_n(x - x_0)|$ , т. е. существует локализация только в направлении  $x$ , центр полосы находится в точке  $x_0$ , которая зависит от  $q_y$ , и характерная ширина полосы равна  $\Delta x \sim \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}(n + 1/2)$ .

Таким образом, найденное решение совершенно не похоже на ларморовский кружок, к которому мы привыкли в классической электродинамике. Если мы выберем калибровку  $A_x = -\mathcal{H}y$ , то решение будет иметь вид

$$\psi_2(\mathbf{r}) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(q_x x + q_z z)\right] \chi_n(y - y_0), \quad y_0 = -\frac{c q_x}{e\mathcal{H}}.$$

Мы имеем полосу, локализованную вдоль  $y$ . Переход от первой калибровки ко второй калибровке осуществляется с помощью функции  $f(x, y) = \mathcal{H}xy$ . Однако  $\psi_1(\mathbf{r})$  не получается из  $\psi_2(\mathbf{r})$  простым умножением на  $\exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \mathcal{H}xy\right)$ . Всё дело в вырождении (энергия не зависит от соответствующего импульса в данной калибровке). Поэтому сумма решений с данной энергией тоже является решением. Правильное соотношение такое (попробуйте доказать):

$$\begin{aligned} \exp(iq_y y/\hbar) \chi_n\left(x - \frac{cq_y}{e\mathcal{H}}\right) &= (-i)^n \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \mathcal{H}xy\right) \sqrt{\frac{2\pi\hbar c}{e\mathcal{H}}} \times \\ &\times \int \frac{dq_x}{2\pi\hbar} \exp\left(-i \frac{cq_x q_y}{\hbar e\mathcal{H}}\right) \exp(iq_x x/\hbar) \chi_n\left(y + \frac{cq_x}{e\mathcal{H}}\right). \end{aligned} \quad (65)$$

В однородном магнитном поле есть два оператора,  $\hat{x}_0$  и  $\hat{y}_0$ , которые коммутируют с гамильтонианом в любой калибровке:

$$\hat{x}_0 = \frac{c}{e\mathcal{H}} \left(\hat{p}_y - \frac{e}{c} A_y\right) + \hat{x}, \quad \hat{y}_0 = -\frac{c}{e\mathcal{H}} \left(\hat{p}_x - \frac{e}{c} A_x\right) + \hat{y}.$$

Классическими аналогами этих операторов являются координаты центра ларморовского кружка. Однако в квантовой механике эти операторы между собой не коммутируют:

$$[\hat{x}_0, \hat{y}_0] = -i \frac{\hbar c}{e\mathcal{H}}.$$

## РАЗДЕЛ 11. ОРБИТАЛЬНЫЙ МОМЕНТ

В классической механике орбитальный момент частицы  $\mathbf{M}$  имеет вид  $\mathbf{M} = [\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$  и имеет такую же размерность, как и постоянная Планка. Поэтому в квантовой механике удобно ввести безразмерный оператор  $\hat{\mathbf{l}}$  углового момента

$$\hat{\mathbf{l}} = \frac{1}{\hbar}[\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}].$$

Используя свойства коммутатора произведения операторов, нетрудно проверить следующие соотношения:

$$\begin{aligned} [\hat{l}_i, \hat{l}_j] &= i\epsilon_{ijk}\hat{l}_k, & [\hat{l}_i, \hat{l}^2] &= 0, \\ [\hat{l}_i, \hat{x}_j] &= i\epsilon_{ijk}\hat{x}_k, & [\hat{l}_i, \hat{p}_j] &= i\epsilon_{ijk}\hat{p}_k. \end{aligned} \quad (66)$$

Так как различные компоненты оператора  $\hat{\mathbf{l}}$  между собой не коммутируют, то нельзя волновую функцию сделать одновременно собственной функцией операторов разных компонент  $\hat{\mathbf{l}}$ . Однако можно найти функции, являющиеся одновременно собственными функциями оператора, например,  $\hat{l}_z$  и оператора  $\hat{l}^2$ . Такие функции называются сферическими. Операторы  $\hat{l}_z$  и  $\hat{l}^2$  в сферических координатах имеют вид

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad \hat{l}^2 = - \left[ \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right], \quad (67)$$

где  $\varphi$  и  $\theta$  — азимутальный и полярный углы.

Пусть в некоторой системе координат амплитуда вероятности найти частицу под азимутальным углом  $\varphi$  равна  $\psi(\varphi)$ . Повернём систему координат вокруг оси  $z$  на угол  $\alpha$  против часовой стрелки. В новой системе координат азимутальный угол  $\tilde{\varphi}$  частицы будет равен  $\tilde{\varphi} = \varphi - \alpha$ , а амплитуда вероятности —  $\tilde{\psi}(\tilde{\varphi}) = \psi(\varphi)$ , так как амплитуда вероятности зависит от точки, но не зависит от системы координат. Поэтому

$$\tilde{\psi}(\varphi) = \psi(\varphi + \alpha) = \exp\left(\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi}\right) \psi(\varphi) = \exp(i\alpha \hat{l}_z) \psi(\varphi).$$

Таким образом, волновая функция  $\tilde{\psi}(\varphi)$  в новой системе координат (здесь  $\varphi$  — азимутальный угол в новой системе координат) получается из волновой функции  $\psi(\varphi)$  в старой системы координат действием оператора  $\exp(i\alpha \hat{l}_z)$ .

Так как ось  $z$  выбрана произвольно, то унитарный оператор

$$\hat{U}_\alpha(\boldsymbol{\zeta}) = \exp(i\alpha \boldsymbol{\zeta} \cdot \hat{\mathbf{l}}),$$

где  $\boldsymbol{\zeta}$  — единичный вектор, является оператором поворота системы координат на угол  $\alpha$  вокруг оси  $\boldsymbol{\zeta}$ . Рассмотрим два последовательных поворота с

помощью унитарных операторов  $\hat{U}_{\alpha_1}(\zeta_1)$  и  $\hat{U}_{\alpha_2}(\zeta_2)$ . Поскольку произведение унитарных операторов также является унитарным оператором, то существуют  $\zeta_3$  и  $\alpha_3$  такие, что

$$\hat{U}_{\alpha_3}(\zeta_3) = \hat{U}_{\alpha_2}(\zeta_2)\hat{U}_{\alpha_1}(\zeta_1).$$

Поэтому говорят, что операторы  $\hat{U}_\alpha(\zeta)$  образуют группу вращения. Так как при малых  $\alpha$  имеем  $\hat{U}_\alpha(\zeta) \approx 1 + i\alpha \zeta \cdot \hat{l}$ , то говорят, что операторы  $\hat{l}$  являются генераторами инфинитезимальных поворотов.

Написав уравнение  $\hat{l}_z \Phi_m = m \Phi_m$ , находим, что

$$\Phi_m(\theta, \varphi) = \exp(im\varphi) F(\theta).$$

Из однозначности функции при повороте на  $\phi = 2\pi$  следует, что собственные значения  $m$  оператора  $\hat{l}_z$  являются целыми числами. Так как ось  $z$  выбрана произвольно, то собственные значения оператора  $\zeta \cdot \hat{l}$ , где  $|\zeta| = 1$ , также являются целыми числами. Поэтому собственные значения  $\Lambda$  линейного оператора  $a\hat{l}_x + b\hat{l}_y + c\hat{l}_z$  равны  $\Lambda = \sqrt{a^2 + b^2 + c^2} m$ , где  $m$  — целые числа.

Из приведённых формул следует важное правило: чтобы определить, обладает ли частица определённой проекцией углового момента на ось  $\zeta$ , достаточно совершить поворот системы координат на произвольный угол  $\alpha$  против часовой стрелки вокруг оси  $\zeta$ . Если при этом волновая функция перейдёт сама в себя, умноженная на  $e^{im\alpha}$ , то частица обладает проекцией  $m$  на ось  $\zeta$ .

Для нахождения собственных функций оператора  $\hat{l}^2$  введём операторы

$$\hat{l}_+ = \hat{l}_x + i\hat{l}_y, \quad \hat{l}_- = \hat{l}_x - i\hat{l}_y, \quad (68)$$

где  $\hat{l}_+$  называется повышающим оператором, а  $\hat{l}_-$  называется понижающим оператором,  $(\hat{l}_+)^+ = \hat{l}_-$ . В сферических координатах эти операторы имеют следующий явный вид

$$\hat{l}_\pm = \exp(\pm i\varphi) \left( \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \operatorname{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \varphi} \right).$$

Коммутационные соотношения операторов  $\hat{l}_+$ ,  $\hat{l}_-$  и  $\hat{l}_z$  следующие:

$$[\hat{l}_z, \hat{l}_+] = \hat{l}_+, \quad [\hat{l}_z, \hat{l}_-] = -\hat{l}_-, \quad [\hat{l}_+, \hat{l}_-] = 2\hat{l}_z.$$

Поэтому

$$\begin{aligned} \hat{l}_z(\hat{l}_+ \Phi_m) &= ([\hat{l}_z, \hat{l}_+] + \hat{l}_+ \hat{l}_z) \Phi_m = (m+1) \hat{l}_+ \Phi_m, \\ \hat{l}_z(\hat{l}_- \Phi_m) &= ([\hat{l}_z, \hat{l}_-] + \hat{l}_- \hat{l}_z) \Phi_m = (m-1) \hat{l}_- \Phi_m. \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\hat{l}_+ \Phi_m = A_m \Phi_{m+1}, \quad \hat{l}_- \Phi_m = B_m \Phi_{m-1}.$$

Для того, чтобы найти коэффициенты  $A_m$  и  $B_m$ , будем считать, что

$$\hat{\mathbf{l}}^2 \Phi_m = \lambda \Phi_m,$$

и представим  $\hat{\mathbf{l}}^2$  в виде

$$\hat{\mathbf{l}}^2 = \hat{l}_+ \hat{l}_- + \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z = \hat{l}_- \hat{l}_+ + \hat{l}_z^2 + \hat{l}_z.$$

Используя нормировку функций  $\Phi_m(\theta, \varphi)$ ,

$$\int d\Omega |\Phi_m(\theta, \varphi)|^2 = 1, \quad d\Omega = \sin \theta d\theta d\varphi,$$

получаем

$$A_m^2 = \lambda - m(m+1), \quad B_m^2 = \lambda - m(m-1).$$

Процесс повышения проекции момента с помощью  $\hat{l}_+$  прекратится, начиная с какого-то  $m = l$ , если  $\lambda = l(l+1)$ . При этом процесс понижения проекции момента с помощью  $\hat{l}_-$  прекратится при  $m = -l$ . Таким образом,

$$A_m = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}, \quad B_m = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}. \quad (69)$$

Окончательно, мы имеем  $(2l+1)$  функций  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ ,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{l}}^2 Y_{l,m}(\theta, \varphi) &= l(l+1) Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad \hat{l}_z Y_{l,m}(\theta, \varphi) = m Y_{l,m}(\theta, \varphi), \\ \hat{l}_+ Y_{l,m}(\theta, \varphi) &= \sqrt{l(l+1) - m(m+1)} Y_{l,m+1}(\theta, \varphi) \equiv \\ &\equiv \sqrt{(l-m)(l+m+1)} Y_{l,m+1}(\theta, \varphi), \\ \hat{l}_- Y_{l,m}(\theta, \varphi) &= \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} Y_{l,m-1}(\theta, \varphi) \equiv \\ &\equiv \sqrt{(l+m)(l-m+1)} Y_{l,m-1}(\theta, \varphi), \end{aligned} \quad (70)$$

причём  $Y_{l,m}(\theta, \varphi) \propto \exp(im\varphi)$ . Можно операторам  $\hat{\mathbf{l}}^2$ ,  $\hat{l}_z$  и  $\hat{l}_\pm$  сопоставить матрицы размером  $(2l+1) \times (2l+1)$ :

$$\begin{aligned} (L^2)_{m',m} &= l(l+1) \delta_{m',m}, \quad (L_z)_{m',m} = m \delta_{m',m}, \\ (L_+)_{m',m} &= \delta_{m',m+1} \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}, \\ (L_-)_{m',m} &= \delta_{m',m-1} \sqrt{l(l+1) - m(m-1)}, \end{aligned} \quad (71)$$

имеющие те же коммутационные соотношения, что и соответствующие операторы. Из симметрии ясно, что

$$\langle l, m | \hat{l}_x^2 | l, m \rangle = \langle l, m | \hat{l}_y^2 | l, m \rangle = \langle l, m | \frac{\hat{\mathbf{l}}^2 - \hat{l}_z^2}{2} | l, m \rangle = \frac{l(l+1) - m^2}{2}.$$

Здесь и далее состояние  $|l, m\rangle$  — собственные состояния оператора  $\hat{\mathbf{l}}^2$  и  $\hat{l}_z$ :  $\hat{\mathbf{l}}^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle$ ,  $\hat{l}_z |l, m\rangle = m |l, m\rangle$ . Таким образом, даже при максимальной проекции момента  $m = l$  среднее  $\langle l, l | \hat{l}_x^2 | l, l \rangle = l/2$  не равно нулю — это чисто квантовый эффект.

Так как  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  являются собственными функциями эрмитовых операторов  $\hat{l}_z$  и  $\hat{l}^2$ , то справедливо соотношение ортогональности

$$\int d\Omega Y_{l',m'}^*(\theta, \varphi) Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}.$$

Для  $l' = m' = 0$  получаем

$$\int d\Omega Y_{l,m}(\theta, \varphi) = 0 \quad \text{при } l \neq 0.$$

Функции  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  образуют полный набор, т. е. произвольную функцию  $\Psi(\theta, \varphi)$ , которая является периодической по  $\varphi$  с периодом  $2\pi$ , на интервале  $0 \leq \theta \leq \pi$  можно представить в виде

$$\Psi(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l c_{l,m} Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad c_{l,m} = \int d\Omega Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) \Psi(\theta, \varphi). \quad (72)$$

Если  $\int d\Omega |\Psi(\theta, \varphi)|^2 = 1$ , то

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l |c_{l,m}|^2 = 1.$$

Поэтому можно сказать, что  $c_{l,m}$  является амплитудой вероятности найти частицу, описываемую волновой функцией  $\Psi(\theta, \varphi)$ , в состоянии с орбитальным моментом  $l$  и с проекцией момента  $m$  на ось  $z$ . Величина  $|c_{l,m}|^2$  является соответствующей вероятностью. Можно задать вопрос о том, какая будет амплитуда вероятности  $\tilde{c}_{l,m'}$  найти частицу, описываемую волновой функцией  $\Psi(\theta, \varphi)$ , в состоянии с орбитальным моментом  $l$  и проекцией момента  $m'$  на ось  $z'$  в повернутой относительно начальной системе координат. Произвольный оператор поворота часто записывают в виде

$$\hat{U} = \hat{U}_\gamma(\mathbf{e}_z) \hat{U}_\beta(\mathbf{e}_y) \hat{U}_\alpha(\mathbf{e}_z),$$

где  $\gamma$ ,  $\beta$  и  $\alpha$  называются углами Эйлера, а  $\mathbf{e}_x$ ,  $\mathbf{e}_y$ , и  $\mathbf{e}_z$  — единичные векторы вдоль соответствующих осей. Действие оператора  $\hat{U}$  на волновую функцию отвечает повороту системы координат  $XYZ$  сначала вокруг оси  $z$  на угол  $\alpha$  ( $XYZ \rightarrow X'Y'Z'$ ), затем в преобразованной системе координат  $X'Y'Z'$  — повороту вокруг новой оси  $Y'$  на угол  $\beta$  ( $X'Y'Z' \rightarrow X''Y''Z''$ ), затем в новой системе  $X''Y''Z''$  — повороту вокруг новой оси  $Z''$  на угол  $\gamma$ .

Подействуем оператором  $\hat{U}$  на левую и правую части разложения (72), тогда

$$\tilde{\Psi}(\theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sum_{m'=-l}^l Y_{l,m'}(\theta, \varphi) \left[ e^{im'\gamma} d_{m',m}^{(l)}(\beta) e^{im\alpha} c_{l,m} \right] =$$

$$= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m'=-l}^l \tilde{c}_{l,m'} Y_{l,m'}(\theta, \varphi),$$

$$d_{m',m}^{(l)}(\beta) = \int d\Omega Y_{l,m'}^*(\theta, \varphi) \hat{U}_{\beta}(\mathbf{e}_y) Y_{l,m}(\theta, \varphi).$$

Окончательно,

$$\tilde{c}_{l,m'} = \sum_{m=-l}^l D_{m',m}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) c_{l,m}, \quad D_{m',m}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) = e^{im'\gamma} d_{m',m}^{(l)}(\beta) e^{im\alpha}.$$

Коэффициенты  $D_{m',m}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma)$  являются компонентами матрицы линейных преобразований в  $(2l+1)$ -мерном пространстве, отвечающих трёхмерному повороту, описываемому углами Эйлера  $\alpha, \beta, \gamma$ . На математическом языке говорят, что матрицы  $D_{m',m}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma)$  образуют  $(2l+1)$ -мерное представление группы вращений. Естественно, что матрица  $D_{m',m}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma)$  является унитарной, т. к. она связывает коэффициенты разложения функции в двух различных ортонормированных базисах.

Соотношение полноты для сферических функций имеет вид

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{l,m}(\theta, \varphi) Y_{l,m}^*(\theta', \varphi') = \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}'),$$

где  $\mathbf{n}$  — единичный вектор, чьё направление определяется углами  $\theta$  и  $\varphi$ , направление единичного вектора  $\mathbf{n}'$  определяется углами  $\theta'$  и  $\varphi'$ , функция  $\delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}')$  определена так, что

$$\int d\Omega \delta(\mathbf{n} - \mathbf{n}') f(\theta, \varphi) = f(\theta', \varphi').$$

Заметим, что сумма

$$\sum_{m=-l}^l |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2$$

не зависит от  $\varphi$  и  $\theta$ . Значение соответствующей константы легко получить, воспользовавшись нормировкой. В результате имеем

$$\sum_{m=-l}^l |Y_{l,m}(\theta, \varphi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi}.$$

## 11.1. Построение сферических функций

В классической механике  $\mathbf{p}^2$  можно представить следующим образом

$$\mathbf{p}^2 = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{p})^2 + \mathbf{p}^2 - (\mathbf{n} \cdot \mathbf{p})^2 = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{p})^2 + ([\mathbf{n} \times \mathbf{p}])^2 = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{p})^2 + \frac{M^2}{r^2}. \quad (73)$$

Аналогично, лапласиан в сферических координатах имеет вид

$$\Delta = \Delta_r - \frac{\hat{l}^2}{r^2},$$

где  $\Delta_r$  — радиальная часть лапласиана,

$$\Delta_r = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}.$$

Рассмотрим однородные полиномы  $\mathcal{P}$  степени  $l$ :

$$\mathcal{P} = \sum_{n_1+n_2+n_3=l} c_{n_1 n_2 n_3} x^{n_1} y^{n_2} z^{n_3}.$$

Покажем, что такие полиномы, удовлетворяющие дополнительному ограничению  $\Delta \mathcal{P} = 0$  (гармонические полиномы), являются собственными функциями оператора  $\hat{l}^2$  с собственным значением  $l(l+1)$ . Действительно, так как

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta,$$

то полином  $\mathcal{P}$  можно представить в виде  $\mathcal{P} = r^l F(\theta, \varphi)$ . Подставив эту форму в уравнение Лапласа  $\Delta \mathcal{P} = 0$ , получаем

$$\hat{l}^2 \mathcal{P} = l(l+1) \mathcal{P}.$$

Осталось только выбрать среди гармонических полиномов такие, которые являются собственными функциями оператора  $\hat{l}_z$  с собственным значением  $m$ . Это легко сделать, если заметить, что

$$\frac{x + iy}{r} = \sin \theta e^{i\varphi}, \quad \frac{x - iy}{r} = \sin \theta e^{-i\varphi}, \quad \frac{z}{r} = \cos \theta, \quad \frac{x^2 + y^2}{r^2} = 1 - \frac{z^2}{r^2} = \sin^2 \theta.$$

Поэтому

$$Y_{l,m} = i^{l+m+|m|} \frac{(x + i\lambda y)^{|m|}}{r^l} \sum_{n=0}^{n_{\max}} a_n (x^2 + y^2)^n z^{l-|m|-2n}, \quad \lambda = \text{sign}(m). \quad (74)$$

Здесь  $n_{\max}$  — максимальное целое число, меньшее или равное  $(l - |m|)/2$ , вещественные коэффициенты  $a_n$  находятся из условия того, что  $r^l Y_{l,m}$  является гармоническим полиномом, и из условия нормировки. При данном выборе фазы в формуле (74) выполняется следующее соотношение:

$$Y_{l,-m} = (-1)^{l-m} Y_{l,m}^*.$$

Кроме того, выполняется равенство

$$Y_{l,m}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_{l,m}(\theta, \phi),$$

которое соответствует преобразованию  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ .

Рассмотрим частные случаи:

$$\begin{aligned} Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, & Y_{1,\pm 1} &= \mp i \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \frac{(x \pm iy)}{r}, & Y_{1,0} &= i \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r}, \\ Y_{2,\pm 2} &= -\sqrt{\frac{15}{32\pi}} \frac{(x \pm iy)^2}{r^2}, & Y_{2,\pm 1} &= \pm \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \frac{(x \pm iy)z}{r^2}, \\ Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \frac{(x^2 + y^2 - 2z^2)}{r^2}. \end{aligned} \quad (75)$$

Для любых  $l$  имеем

$$Y_{l,0} = i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta), \quad Y_{l,\pm l} = (\mp i)^l \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} \frac{(x \pm iy)^l}{2^l l! r^l}.$$

Здесь  $P_l(z)$  — полиномы Лежандра, удовлетворяющие уравнению

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial}{\partial z} (1 - z^2) \frac{\partial}{\partial z} + l(l+1) \right] P_l(z) &= 0, & P_l(1) &= 1, \\ P_l(z) &= \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dz^l} (z^2 - 1)^l, & \int_{-1}^1 dz P_l^2(z) &= \frac{2}{2l+1}. \end{aligned} \quad (76)$$

Приведём ещё несколько полезных соотношений:

$$\sum_{m=-l}^l Y_{l,m}^*(\theta, \varphi) Y_{l,m}(\theta', \varphi') = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}').$$

Это соотношение можно объяснить следующим образом. После суммирования по  $m$  результат может зависеть только от  $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}'$ . С другой стороны, результат должен быть собственной функцией  $\hat{\mathbf{l}}^2$  с собственным значением  $l(l+1)$  (так как левая часть является такой функцией). Поэтому правая часть должна быть пропорциональна  $P_l(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}')$ . Полагая  $\mathbf{n} = \mathbf{n}'$ , находим коэффициент пропорциональности. Следуя той же логике, нетрудно показать, что

$$\int d\Omega_1 P_l(\mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{n}_1) P_{l'}(\mathbf{n}_3 \cdot \mathbf{n}_1) = \delta_{l,l'} \frac{4\pi}{2l+1} P_l(\mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{n}_3).$$

Наконец, используя соотношение

$$Y_{l,m}(\theta = 0, \varphi) = i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} \delta_{0,m},$$



найдем связь между сферическими функциями  $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$  и матрицей поворотов  $D_{m',m}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma)$ :

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} D_{0,m}^{(l)}(\varphi, \theta, 0).$$

## 11.2. Тензорное представление группы вращений

Обсудим ещё один способ построения сферических функций. Рассмотрим поворот системы координат, при котором новые координаты вектора  $\tilde{x}^i$  связаны со старыми координатами  $x^i$  с помощью матрицы поворота  $U_j^i$ :

$$\tilde{x}^i = U_j^i x^j,$$

где подразумевается суммирование по повторяющимся нижним и верхним индексам. Тензором  $n$ -го ранга  $T^{i_1 i_2 \dots i_n}$  относительно преобразований вращения трехмерного пространства называется объект с  $n$  индексами, который при повороте преобразуется как произведение компонент векторов:

$$\tilde{T}^{i_1 i_2 \dots i_n} = U_{j_1}^{i_1} U_{j_2}^{i_2} \dots U_{j_n}^{i_n} T^{j_1 j_2 \dots j_n}.$$

Матрицы поворота  $U_j^i$  являются ортогональными ( $U^T = U^{-1}$ ) с равным единице определителем:

$$U_i^{i'} U_j^{j'} \delta^{ij} = \delta^{i'j'}, \quad U_i^{i'} U_j^{j'} \delta_{i'j'} = \delta_{ij}, \quad \det(U) = 1,$$

т. е.  $\tilde{\delta}^{ij} = \delta^{ij}$ . Тензор называется инвариантным, если  $\tilde{T}^{i_1 i_2 \dots i_n} = T^{i_1 i_2 \dots i_n}$ . Следовательно,  $\delta^{ij}$  является инвариантным тензором. Кроме  $\delta^{ij}$  для группы вращений инвариантным тензором является  $\epsilon^{ijk}$ , так как

$$U_i^{i'} U_j^{j'} U_k^{k'} \epsilon^{ijk} = \det(U) \epsilon^{i'j'k'} = \epsilon^{i'j'k'}.$$

Если  $T^{i_1 i_2 \dots i_n}$  свернуть с  $\delta_{i_1 i_2}$  (т. е. вычислить след по индексам  $i_1$  и  $i_2$ ), то получится тензор ранга  $n-2$ :  $\delta_{i_1 i_2} T^{i_1 i_2 i_3 \dots i_n}$ . Тензор называется неприводимым, если свертка тензора по любым двум индексам  $i$  и  $j$  с  $\delta_{ij}$  и с  $\epsilon_{ijk}$  даёт ноль, т. е. нельзя понизить ранг тензора. Для группы вращений тензор является неприводимым, если он является симметричным по всем индексам с равным нулю следом по любым двум индексам. Гармонические полиномы степени  $l$  являются компонентами неприводимого тензора  $T^{i_1 \dots i_l}$  ранга  $l$ , построенного из тензоров  $t^{i_1 \dots i_n} = x^{i_1} x^{i_2} \dots x^{i_n}$  и  $r^2 \delta^{ij}$ . Например:

$$T^i = t^i, \quad T^{ij} = t^{ij} - \frac{r^2}{3} \delta^{ij}, \quad T^{ijk} = t^{ijk} - \frac{r^2}{5} (\delta^{ij} t^k + \delta^{ik} t^j + \delta^{jk} t^i). \quad (77)$$

Покажем, что количество независимых компонент тензора  $T^{i_1 \dots i_l}$  равно  $(2l + 1)$ . Найдём сначала  $p$  — количество независимых компонент симметричного тензора  $t^{i_1 \dots i_l}$ . Оно совпадает с количеством решений уравнения

$$n_1 + n_2 + n_3 = l,$$

где  $n_1$ ,  $n_2$  и  $n_3$  являются количеством единиц, двоек и троек. Так как количество решений уравнения  $n_1 + n_2 = k$  равно  $k + 1$ , то

$$p = \sum_{k=0}^l (k + 1) = \frac{(l + 1)(l + 2)}{2}.$$

Требование равенства нулю следа по двум индексам соответствует  $l(l - 1)/2$  условиям. Поэтому количество независимых компонент бесследового симметричного тензора ранга  $l$  равно

$$\frac{(l + 1)(l + 2)}{2} - \frac{l(l - 1)}{2} = 2l + 1,$$

и совпадает с количеством сферических функций  $Y_{lm}$  при данном  $l$ . Сферические функции  $Y_{l,m}$  являются линейными комбинациями компонент неприводимого тензора  $T^{i_1 \dots i_l}$ . Например, для  $l = 2$  из (77) имеем  $T^{ij} = x^i x^j - \frac{r^2}{3} \delta^{ij}$ ,

$$r^2 Y_{2,\pm 2} \propto T^{11} - T^{22} \pm 2iT^{12}, \quad r^2 Y_{2,\pm 1} \propto T^{13} \pm iT^{23}, \quad r^2 Y_{2,0} \propto T^{33}. \quad (78)$$

### Типичные задачи

1. Рассмотрим состояния с  $l = 1$  и  $m = \pm 1, 0$ . Операторы  $\hat{\mathbf{l}}$  и  $\exp(i\gamma \hat{l}_z)$  в базисе  $Y_{1,m}$  имеют вид

$$\hat{l}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{l}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{l}_y = \frac{1}{i\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\exp(i\alpha \hat{l}_z) = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix} = 1 + i \sin \alpha \hat{l}_z + (\cos \alpha - 1) \hat{l}_z^2.$$

Поэтому для произвольного  $\zeta$  имеем

$$\exp(i\alpha \zeta \cdot \hat{\mathbf{l}}) = 1 + i \sin \alpha (\zeta \cdot \hat{\mathbf{l}}) + (\cos \alpha - 1) (\zeta \cdot \hat{\mathbf{l}})^2.$$

Отсюда находим

$$\hat{U} = \hat{U}_\gamma(\mathbf{e}_z) \hat{U}_\beta(\mathbf{e}_y) \hat{U}_\alpha(\mathbf{e}_z) =$$

$$= \begin{pmatrix} e^{i(\gamma+\alpha)} \cos^2(\beta/2) & e^{i\gamma} \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & e^{i(\gamma-\alpha)} \sin^2(\beta/2) \\ -e^{i\alpha} \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & \cos \beta & e^{-i\alpha} \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} \\ e^{-i(\gamma-\alpha)} \sin^2(\beta/2) & -e^{-i\gamma} \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & e^{-i(\gamma+\alpha)} \cos^2(\beta/2) \end{pmatrix}. \quad (79)$$

С помощью этой матрицы можно ответить, например, на следующий вопрос. Пусть частица находится в состоянии с  $l = 1$  и с проекцией  $m = 1$  на ось  $z$ . Надо найти вероятность того, что частица будет иметь проекции момента  $m = \pm 1, 0$  на ось  $z'$ , направленную под углом  $\beta$  к оси  $z$ . Для этого вычислим

$$\hat{U} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i(\gamma+\alpha)} \cos^2(\beta/2) \\ -e^{i\alpha} \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} \\ e^{-i(\gamma-\alpha)} \sin^2(\beta/2) \end{pmatrix}. \quad (80)$$

Поэтому

$$W_1 = \cos^4(\beta/2), \quad W_0 = \frac{\sin^2 \beta}{2}, \quad W_{-1} = \sin^4(\beta/2).$$

Естественно, вероятности зависят только от угла  $\beta$  между осью  $z$  и  $z'$ .

2. Решим предыдущую задачу другим способом. Наша волновая функция равна  $\Psi = Y_{1,1}$ . В системе, в которой за ось  $z$  выбрана ось вдоль вектора  $\zeta$ , та же волновая функция будет иметь вид

$$\Psi = c_1 \tilde{Y}_{1,1} + c_0 \tilde{Y}_{1,0} + c_{-1} \tilde{Y}_{1,-1}.$$

Рассмотрим среднее значение операторов  $\zeta \cdot \hat{l}$  и  $(\zeta \cdot \hat{l})^2$ . Матричные элементы не зависят от системы координат. Поэтому мы вычислим их в одной системе и в другой системе, а затем приравняем результаты. Имеем

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \zeta \cdot \hat{l} | \Psi \rangle &= \cos \beta = |c_1|^2 - |c_{-1}|^2, \\ \langle \Psi | (\zeta \cdot \hat{l})^2 | \Psi \rangle &= \frac{1 + \cos^2 \beta}{2} = |c_1|^2 + |c_{-1}|^2, \\ 1 &= |c_1|^2 + |c_0|^2 + |c_{-1}|^2. \end{aligned} \quad (81)$$

Последнее уравнение — это условие нормировки. Матричные элементы находятся следующим образом. Представим  $\zeta \cdot \hat{l} = \cos \beta \hat{l}_z + \sin \beta \hat{l}_x$  и учтём, что  $\langle 1, 1 | \hat{l}_x | 1, 1 \rangle = 0$ . Далее, запишем

$$(\zeta \cdot \hat{l})^2 = \cos^2 \beta \hat{l}_z^2 + \sin^2 \beta \hat{l}_x^2 + \sin \beta \cos \beta (\hat{l}_z \hat{l}_x + \hat{l}_x \hat{l}_z)$$

и учтём, что

$$\langle 1, 1 | \hat{l}_x^2 | 1, 1 \rangle = \frac{1}{2}, \quad \langle 1, 1 | (\hat{l}_z \hat{l}_x + \hat{l}_x \hat{l}_z) | 1, 1 \rangle = 0.$$

Решая систему линейных уравнений относительно  $|c_i|^2$ , находим  $W_1 = |c_1|^2$ ,  $W_0 = |c_0|^2$  и  $W_{-1} = |c_{-1}|^2$ .

3. Пусть частица описывается нормированной волновой функцией  $\Psi = \sqrt{5/(4\pi)} x^2/r^2$ , где мы учли соотношение  $\int d\Omega x^4/r^4 = 4\pi/5$ . Надо найти вероятности иметь различные орбитальные моменты  $l$  и различные проекции углового момента  $m$  на ось  $z$ . Полином второй степени  $x^2$  не является гармоническим полиномом. Поэтому представим его в виде  $x^2 = (x^2 - r^2/3) + r^2/3$ . Слагаемое  $r^2/3$  является сферически-симметричным и соответствует моменту  $l = 0$ , а слагаемое  $(x^2 - r^2/3)$  является гармоническим полиномом второй степени и соответствует моменту  $l = 2$ . Используя выражения для волновых функций, получаем

$$\Psi = \frac{\sqrt{5}}{3} Y_{0,0} + \frac{1}{3} Y_{2,0} - \frac{1}{\sqrt{6}} (Y_{2,2} + Y_{2,-2}).$$

В результате для  $W_{l,m} = |c_{l,m}|^2$  находим

$$W_{0,0} = \frac{5}{9}, \quad W_{2,0} = \frac{1}{9}, \quad W_{2,2} = \frac{1}{6}, \quad W_{2,-2} = \frac{1}{6}.$$

4. Рассмотрим произведение сферических функций

$$\Psi(\theta, \varphi) = Y_{l,m}(\theta, \varphi) Y_{L,M}(\theta, \varphi).$$

Так как  $Y_{l,m} \propto \exp(im\varphi)$ ,  $Y_{L,M} \propto \exp(iM\varphi)$ , то  $\Psi \propto \exp[i(m+M)\varphi]$ . Далее,  $r^{l+L}\Psi$  является полиномом степени  $l+L$ , но не является гармоническим полиномом. Чётность  $\Psi$  равна  $(-1)^{l+L}$ . Для того, чтобы понять структуру  $\Psi$ , проще всего воспользоваться тензорным представлением гармонических полиномов. Из него следует, что для того чтобы сделать из  $\Psi$  гармонический полином, надо вычесть и прибавить из произведения  $T^{i_1 \dots i_l} T^{i_1 \dots i_L}$  соответствующие свёртки по чётному числу индексов. Поэтому  $\Psi$  можно представить в виде

$$\Psi(\theta, \varphi) = \sum_{n=0}^{n_{\max}} a_n Y_{l+L-2n, m+M}(\theta, \varphi), \quad n_{\max} = \min(l, L),$$

где  $a_n$  — некоторые числа. Таким образом, в сумме присутствуют орбитальные моменты от  $|L-l|$  до  $L+l$  через два.

## РАЗДЕЛ 12. СПИН

Рассмотрим оператор Гамильтониан частицы с зарядом  $e$  в однородном магнитном поле  $\mathcal{H}$  и выберем калибровку  $\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathcal{H} \times \hat{\mathbf{r}}]$ :

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{2c} [\mathcal{H} \times \mathbf{r}] \right)^2 = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\mathbf{l}} \cdot \mathcal{H} + \frac{e^2}{8mc^2} [\mathcal{H} \times \hat{\mathbf{r}}]^2,$$

где мы использовали соотношение  $[\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] = \hbar \hat{\mathbf{l}}$ .

Гамильтониан, описывающий взаимодействие магнитного момента с магнитным полем, равен  $\delta H = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathcal{H}$ . Поэтому мы заключаем, что оператор магнитного момента, связанный с движением заряженной частицы, равен

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{e\hbar}{2mc} \hat{\mathbf{l}},$$

а энергия взаимодействия в слабом магнитном поле, направленном вдоль оси  $z$ , равна  $E = -\frac{e\hbar l_z}{2mc} \mathcal{H}$ . Для неоднородного поля, зависящего от  $z$ , можно

предположить, что на частицу будет действовать сила  $F_z = \frac{e\hbar l_z}{2mc} \left( \frac{\partial}{\partial z} \mathcal{H} \right)$ , зависящая от  $l_z$ . При данном  $l$  количество состояний с разными  $l_z$  равно  $2l + 1$  — нечётное число. Поэтому считалось, что при пропускании атомов через область с градиентом магнитного поля пучок неполяризованных частиц, содержащих одинаковое количество частиц с разными  $l_z$ , будет расщепляться на нечётное количество пучков из-за разных сил, действующих на частицы. Однако в опытах Штерна и Герлаха (1922 г.) при прохождении пучка нейтральных атомов серебра через область с неоднородным поперечным магнитным полем были видны два пятна! Это привело Уленбека и Гаудсмита в 1925 г. к гипотезе о существовании внутреннего момента электрона (спина), равного  $1/2$ . Мы видели, что для существования максимальной ( $J$ ) и минимальной ( $-J$ ) проекций момента необходимо, чтобы  $2J + 1$  было целым числом. Это возможно как при целом  $J$ , так и при полуцелом  $J$ . Для орбитального углового момента полуцелого  $l$  быть не может, что связано с однозначностью пространственной волновой функции, а для внутреннего момента такого требования нет. Оператор внутреннего момента (спин) обычно обозначают  $\hat{\mathbf{S}}$ . Коммутационные соотношения компонент  $\hat{S}_i$  оператора спина такие же, как и для компонент  $\hat{l}_i$  оператора орбитального углового момента

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i\epsilon_{ijk} \hat{S}_k, \quad [\hat{S}_i, \hat{\mathbf{S}}^2] = 0. \quad (82)$$

Однако оператор спина коммутирует с  $\mathbf{r}$ ,  $\hat{\mathbf{p}}$  и  $\hat{\mathbf{l}}$ , так как действует на внутренние степени свободы, а не на пространственные. Внутренние степени свободы описываются многокомпонентной волновой функцией. Для каждой частицы оператор спина имеет фиксированное значение: для электрона, протона, нейтрона, нейтрино  $S = 1/2$ . Электрон может иметь проекции на ось  $z$

$S_z = \pm 1/2$ , и его внутреннюю волновую функцию  $\chi$  можно записать в виде

$$\chi = a |1/2, 1/2\rangle + b |1/2, -1/2\rangle = a\chi_+ + b\chi_- = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

где  $|S, S_z\rangle$  означает состояние со спином  $S$  и проекцией спина на ось  $z$   $S_z$ ,  $a$  — амплитуда вероятности найти частицу со спином  $1/2$  в состоянии с проекцией  $S_z = +1/2$ , а  $b$  — амплитуда вероятности найти частицу со спином  $1/2$  в состоянии с  $S_z = -1/2$ . Двухкомпонентный столбец называется спинором. Используя приведённые выше формулы (70) для операторов момента, находим:

$$\begin{aligned} \hat{S}_z\chi_+ &= \frac{1}{2}\chi_+, & \hat{S}_z\chi_- &= -\frac{1}{2}\chi_-, \\ \hat{S}_+\chi_+ &= 0, & \hat{S}_+\chi_- &= \chi_+, \\ \hat{S}_-\chi_+ &= \chi_-, & \hat{S}_-\chi_- &= 0. \end{aligned}$$

Таким образом, оператору спина  $\hat{\mathbf{S}}$  для  $S = 1/2$  можно сопоставить матрицы

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (83)$$

где  $\boldsymbol{\sigma}$  называются матрицами Паули. Эти матрицы удовлетворяют соотношениям

$$\begin{aligned} \sigma_i\sigma_j &= \delta_{ij}I + i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \\ \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i &= 2\delta_{ij}I, \quad \sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \quad (\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = \mathbf{a}^2I, \\ \text{Sp } \sigma_i &= 0, \quad \text{Sp } (\sigma_i\sigma_j) = 2\delta_{ij}. \end{aligned} \quad (84)$$

Здесь  $I$  — единичная матрица размерности  $2 \times 2$ . Любую матрицу  $U$  размерности  $2 \times 2$  можно представить в виде

$$U = aI + \mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad a = \frac{1}{2}\text{Sp } U, \quad \mathbf{b} = \frac{1}{2}\text{Sp}(U\boldsymbol{\sigma}).$$

Используя соотношения для матриц Паули, находим матрицу поворота на угол  $\alpha$  вокруг оси  $\boldsymbol{\zeta}$ :

$$U_\alpha(\boldsymbol{\zeta}) = e^{i\alpha\boldsymbol{\zeta} \cdot \hat{\mathbf{S}}} = \exp\left(\frac{i}{2}\alpha\boldsymbol{\zeta} \cdot \boldsymbol{\sigma}\right) = I\cos(\alpha/2) + i(\boldsymbol{\zeta} \cdot \boldsymbol{\sigma})\sin(\alpha/2). \quad (85)$$

Матрица поворота, выраженная через углы Эйлера, имеет простой вид

$$\hat{U} = \hat{U}_\gamma(\mathbf{e}_z)\hat{U}_\beta(\mathbf{e}_y)\hat{U}_\alpha(\mathbf{e}_z) = \begin{pmatrix} e^{i(\gamma+\alpha)/2}\cos(\frac{\beta}{2}) & e^{i(\gamma-\alpha)/2}\sin(\frac{\beta}{2}) \\ -e^{i(\alpha-\gamma)/2}\sin(\frac{\beta}{2}) & e^{-i(\gamma+\alpha)/2}\cos(\frac{\beta}{2}) \end{pmatrix}. \quad (86)$$

1. Ответим на вопрос, какой должен быть спинор в нашей системе координат, если амплитуда вероятности иметь проекцию спина  $1/2$  на ось  $\zeta$  в системе, определяемой углами Эйлера, равна единице. Имеем

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad \text{или} \quad \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = U^{-1} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = U^+ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Окончательно

$$\chi_{\zeta} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = e^{-i\gamma/2} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} \cos(\beta/2) \\ e^{i\alpha/2} \sin(\beta/2) \end{pmatrix}. \quad (87)$$

Таким образом, вероятность найти электрон с проекцией спина на ось  $z$   $1/2$  равна  $W_{1/2} = \cos^2(\beta/2)$ , а вероятность найти электрон с проекцией спина на ось  $z$   $-1/2$  равна  $W_{-1/2} = \sin^2(\beta/2)$ . Спинор  $\chi_{\zeta}$  можно получить другим способом. Очевидно, он является собственной функцией оператора  $(\zeta \cdot \sigma)$  с собственным значением равным единице. Имеем

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix},$$

где  $\theta$  и  $\phi$  — полярный и азимутальный углы вектора  $\zeta$ , компоненты которого равны  $\zeta_x = \sin \theta \cos \phi$ ,  $\zeta_y = \sin \theta \sin \phi$  и  $\zeta_z = \cos \theta$ . Решая уравнение

$$(e^{-i\phi} \sin \theta) b = (1 - \cos \theta) a$$

с учётом нормировки  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ , находим  $a = e^{-i\phi/2} \cos(\theta/2)$  и  $b = e^{i\phi/2} \sin(\theta/2)$ , что совпадает с (87) при  $\alpha = \phi$  и  $\beta = \theta$  (с точностью до общего несущественного множителя  $e^{-i\gamma/2}$ ).

2. Ответим теперь на обратный вопрос. Пусть задан произвольный спинор  $\chi$ . Найти направление  $\zeta$ , для которого амплитуда вероятности иметь проекцию спина  $+1/2$  равна единице. Это всегда можно сделать, так как спинор имеет три независимых параметра (два комплексных числа, связанные одним условием нормировки), и у нас есть три угла Эйлера, чтобы поворотом превратить спинор  $\chi$  в спинор  $\chi_+$ . Простейшее решение задачи состоит в следующем. Рассмотрим систему координат, в которой ось  $z$  направлена вдоль вектора  $\zeta$ . В этой системе

$$\langle \chi_+ | \sigma^i | \chi_+ \rangle = \delta^{i3}.$$

Поэтому в произвольной системе

$$\langle \chi | \sigma | \chi \rangle = \zeta.$$

Итак, для частиц со спином  $S = 1/2$  всегда существует направление, для которого с единичной амплитудой проекция спина равна  $1/2$ . Для  $S > 1/2$ ,

вообще говоря, не существует направления, для которого произвольный столбец с  $2S + 1$  ненулевыми элементами превращается с помощью поворота в столбец с одним ненулевым элементом.

3. Со спином связан спиновый магнитный момент. Операторы спиновых магнитных моментов электрона, протона и нейтрона с хорошей точностью равны

$$\hat{\mu}_{es} = -\frac{|e|\hbar}{2m_e c} \boldsymbol{\sigma}, \quad \hat{\mu}_{ps} = 2,79 \frac{|e|\hbar}{2m_p c} \boldsymbol{\sigma}, \quad \hat{\mu}_{ns} = -1,91 \frac{|e|\hbar}{2m_p c} \boldsymbol{\sigma}.$$

Здесь  $e = -|e|$  — заряд электрона,  $\mu_B = |e|\hbar/(2m_e c)$  — магнетон Бора,  $\mu_N = |e|\hbar/(2m_p c)$  — ядерный магнетон. Полный магнитный момент электрона равен

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}_e = -\mu_B (\hat{\mathbf{l}} + 2\hat{\mathbf{S}}).$$

Поскольку пучки электронов имеют макроскопические размеры, то в силу соотношения неопределённостей разброс  $\Delta l_z$  является огромной величиной. Поэтому, при прохождении пучка электронов через прибор Штерна — Герлаха пространственное разделение неполяризованного пучка электронов на несколько пучков в зависимости от проекции спина не происходит. Поэтому эффект Штерна — Герлаха наблюдается только при прохождении через градиент поля нейтральных частиц.

4. Спин фотона. Рассмотрим фотон с волновым вектором  $\mathbf{k}$ , параллельным оси  $z$ . Волновой функцией фотона является его вектор поляризации. Для циркулярно-поляризованного фотона поляризация  $\boldsymbol{\epsilon}_\lambda$  равна

$$\boldsymbol{\epsilon}_\lambda = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_x + i\lambda \mathbf{e}_y),$$

где  $\mathbf{e}_x$  и  $\mathbf{e}_y$  — единичные векторы, параллельные осям  $x$  и  $y$ ,  $\lambda = \pm 1$ ,  $\lambda = +1$  отвечает право-поляризованному фотону, а  $\lambda = -1$  отвечает лево-поляризованному фотону. Для того, чтобы узнать, обладает ли фотон определённой проекцией углового момента на ось  $z$ , совершим поворот системы координат против часовой стрелки на угол  $\alpha$  вокруг оси  $z$ . Имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_x &= \mathbf{e}'_x \cos \alpha - \mathbf{e}'_y \sin \alpha, & \mathbf{e}_y &= \mathbf{e}'_x \sin \alpha + \mathbf{e}'_y \cos \alpha, \\ \boldsymbol{\epsilon}_\lambda &= e^{i\lambda\alpha} \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}'_x + i\lambda \mathbf{e}'_y). \end{aligned} \tag{88}$$

Таким образом, проекция углового момента на ось  $z$  для циркулярно-поляризованного фотона равна  $\lambda$ , а линейно поляризованный фотон является суперпозицией состояний с проекцией углового момента  $+1$  и  $-1$ . Вывод: спин у фотона равен единице. А где же состояние с проекцией спина ноль на ось  $z$ ? Такой проекции отвечал бы вектор поляризации  $\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{e}_z$ , но у фотона  $\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\epsilon} = 0$ .



## 12.1. Уравнение Паули

Нерелятивистская частица со спином  $S = 1/2$ , электрическим зарядом  $e$  и спиновым магнитным моментом  $\mu_s$  во внешнем электромагнитном поле описывается уравнением Паули

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t), \\
 \hat{H} &= \frac{\left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2}{2m} + e\varphi(\mathbf{r}, t) - \mu_s \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}}, \\
 \Psi(\mathbf{r}, t) &= \begin{pmatrix} a(\mathbf{r}, t) \\ b(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{89}$$

Для того чтобы иметь интерпретацию результатов, нам надо получить уравнение непрерывности, следующее из уравнения Паули. Действуя так же, как и при выводе плотности тока  $\rho(\mathbf{r}, t)$  и тока  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$  для уравнения Шредингера, мы получим для уравнения Паули

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \operatorname{div} \mathbf{j}_k(\mathbf{r}, t) &= 0, \\
 \rho(\mathbf{r}, t) &= \Psi^+(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t), \\
 \mathbf{j}_k(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{2} \{ \Psi^+(\mathbf{r}, t) [\hat{\mathbf{v}} \Psi(\mathbf{r}, t)] + [\hat{\mathbf{v}} \Psi(\mathbf{r}, t)]^+ \Psi(\mathbf{r}, t) \}, \\
 \hat{\mathbf{v}} &= \frac{\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{m}.
 \end{aligned} \tag{90}$$

Однако, уравнение непрерывности не изменится, если к току  $\mathbf{j}_k(\mathbf{r}, t)$  прибавить так называемый спиновый ток  $\mathbf{j}_s(\mathbf{r}, t)$ , который является ротором некоторого вектора, поскольку дивергенция ротора равна нулю. Для того, чтобы найти спиновый ток, необходимо действовать другим способом, аналогичным тому, который используют в электродинамике сплошных сред. А именно, электрический ток  $\mathbf{J}_{ch}(\mathbf{r}, t)$  можно получить, используя соотношение

$$\mathbf{J}_{ch}(\mathbf{r}, t) = -c \int d^3r' \Psi^+(\mathbf{r}', t) \frac{\delta \hat{H}}{\delta \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)} \Psi(\mathbf{r}', t), \tag{91}$$

который связан с током  $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j}_k(\mathbf{r}, t) + \mathbf{j}_s(\mathbf{r}, t)$  следующим соотношением:  $\mathbf{J}_{ch}(\mathbf{r}, t) = e\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ . В результате получаем для  $\mathbf{j}_s(\mathbf{r}, t)$  (проверьте)

$$\mathbf{j}_s(\mathbf{r}, t) = \frac{c\mu_s}{e} \nabla \times \left[ \Psi^+(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\sigma} \Psi(\mathbf{r}, t) \right].$$

Из уравнения непрерывности следует условие нормировки

$$\int d^3r \Psi^+(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t) = \int d^3r [ |a(\mathbf{r}, t)|^2 + |b(\mathbf{r}, t)|^2 ] = 1.$$

Функция  $|a(\mathbf{r}, t)|^2$  является плотностью вероятности найти частицу в точке  $\mathbf{r}$  в момент времени  $t$  с проекцией спина  $+1/2$ , а функция  $|b(\mathbf{r}, t)|^2$  является плотностью вероятности найти частицу в точке  $\mathbf{r}$  в момент времени  $t$  с проекцией спина  $-1/2$ .

## 12.2. Движение спина в магнитном поле

Воспользуемся уравнением Гейзенберга для оператора спина

$$\frac{d}{dt} \hat{\mathbf{S}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\mathbf{S}}] = -\frac{i\mu_s}{\hbar S} [\hat{\mathbf{S}} \cdot \mathcal{H}, \hat{\mathbf{S}}] = -\frac{\mu_s}{\hbar S} [\mathcal{H} \times \hat{\mathbf{S}}].$$

Таким образом, спин крутится вокруг магнитного поля с мгновенной частотой  $\Omega = -\mu_s \mathcal{H} / (\hbar S)$ . Для электрона эта частота равна  $\Omega = |e| \mathcal{H} / (mc)$ . Если магнитное поле не зависит от времени и координаты, то  $\mathcal{H} \cdot \hat{\mathbf{S}}$  не зависит от времени, т. е. угол между направлениями спина и магнитного поля сохраняется.

Обсудим явление ядерного магнитного резонанса. Рассмотрим движение спина  $S = 1/2$  покоящейся частицы в переменном магнитном поле

$$(\mathcal{H}_x, \mathcal{H}_y, \mathcal{H}_z) = (H_1 \cos(\omega t), -H_1 \sin(\omega t), H_0).$$

Уравнение Паули имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = -\mu_s \begin{pmatrix} H_0 & e^{i\omega t} H_1 \\ e^{-i\omega t} H_1 & -H_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

или

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{a} &= -\mu_s [H_0 a + e^{i\omega t} H_1 b], \\ i\hbar \dot{b} &= -\mu_s [e^{-i\omega t} H_1 a - H_0 b]. \end{aligned}$$

Мы будем решать эти уравнения с начальными условиями  $a(0) = 1, b(0) = 0$ . Перейдём от переменных  $a$  и  $b$  к переменным  $a_1$  и  $b_1$ :

$$a = a_1 e^{i\omega t/2}, \quad b = b_1 e^{-i\omega t/2}.$$

Получаем

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{a}_1 &= -[(\mu_s H_0 - \hbar\omega/2) a_1 + \mu_s H_1 b_1], \\ i\hbar \dot{b}_1 &= -[\mu_s H_1 a_1 - (\mu_s H_0 - \hbar\omega/2) b_1]. \end{aligned}$$

Эту систему удобно снова переписать в матричном виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi_1(t) = -[(\mu_s H_0 - \hbar\omega/2) \sigma_z + \mu_s H_1 \sigma_x] \Psi_1(t), \quad \Psi_1(t) = \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix}.$$

Решение этого матричного уравнения имеет вид

$$\Psi_1(t) = \exp(it \mathbf{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \Psi_1(0),$$

$$\mathbf{\Omega} = (\mu_s H_0 / \hbar - \omega/2) \mathbf{e}_z + (\mu_s H_1 / \hbar) \mathbf{e}_x, \quad \Psi_1(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Используя свойства матриц Паули, находим

$$\Psi_1(t) = \left[ \cos(\Omega t) + i \frac{(\mathbf{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma})}{\Omega} \sin(\Omega t) \right] \Psi_1(0), \quad (92)$$

$$\Omega = \sqrt{(\mu_s H_0 / \hbar - \omega/2)^2 + (\mu_s H_1 / \hbar)^2}.$$

Окончательно,

$$W_{1/2}(t) = |a(t)|^2 = \cos^2(\Omega t) + \frac{(\mu_s H_0 / \hbar - \omega/2)^2}{\Omega^2} \sin^2(\Omega t),$$

$$W_{-1/2}(t) = |b(t)|^2 = \frac{(\mu_s H_1 / \hbar)^2}{\Omega^2} \sin^2(\Omega t).$$

Максимальное значение  $W_{-1/2}(t)$  равно  $(\mu_s H_1 / \hbar)^2 / \Omega^2$ . Для того, чтобы это значение равнялось единице, необходимо выполнение условия  $\hbar \omega_R = 2\mu_s H_0$  (условие ядерного магнитного резонанса). Это условие имеет простой физический смысл. Переменное магнитное поле отвечает полю циркулярно-поляризованного фотона, движущегося вдоль оси  $z$ . При поглощении фотона энергия системы должна измениться на  $\hbar \omega$ , а при перевороте спина энергия системы меняется на  $2\mu_s H_0$ . Приравнявая два значения, получаем условие резонанса. Ширина резонанса очевидно равна  $\delta \omega \sim \mu_s H_1 / \hbar$ , а качество сигнала определяется отношением  $\delta \omega / \omega_R \sim H_1 / H_0 \ll 1$ .

Заметим, что условие резонанса выполняется только при определённом знаке  $\omega$ . Это связано с законом сохранения проекции углового момента на ось  $z$ . Если фотон был лево-поляризованным, то его проекция момента была  $-1$ . Тогда он может поглотиться, если состояние магнитного момента с наименьшей энергией отвечает проекции момента  $S_z = +1/2$ . После поглощения фотона и переворота спина проекция момента будет  $S_z = -1/2$ , т. е. равна суммарной начальной проекции момента.

**Задача 12.1.** Рассмотрите ЯМР для спина  $S = 1$ , найдите  $W_1(t)$ ,  $W_0(t)$ ,  $W_{-1}(t)$  при условии  $W_1(0) = 1$ .

## РАЗДЕЛ 13. СЛОЖЕНИЕ МОМЕНТОВ

Рассмотрим два оператора спина  $\hat{\mathbf{S}}_1$  и  $\hat{\mathbf{S}}_2$  для двух невзаимодействующих частиц (или оператор спина  $\hat{\mathbf{S}}$  и оператор углового момента  $\hat{\mathbf{L}}$ , или два оператора углового момента  $\hat{\mathbf{L}}_1$  и  $\hat{\mathbf{L}}_2$ , действующие на угловые переменные разных частиц). Введём оператор  $\hat{\mathbf{J}}$  полного спина,  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$ . Так как  $[\hat{\mathbf{S}}_1, \hat{\mathbf{S}}_2] = 0$ , то коммутаторы компонент  $\hat{\mathbf{J}}$  такие же, как и у компонент любого оператора углового момента:

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\epsilon_{ijk}\hat{J}_k.$$

Введём функции

$$|S_1, m_1; S_2, m_2\rangle \equiv |S_1, m_1\rangle |S_2, m_2\rangle. \quad (93)$$

Эти функции являются собственными функциями оператора  $\hat{J}_z = \hat{S}_{1z} + \hat{S}_{2z}$  с собственными значениями  $m_1 + m_2$ . Однако, они не являются собственными функциями оператора  $\hat{\mathbf{J}}^2 = (\hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2)^2$ , так как

$$\hat{\mathbf{J}}^2 = \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2\hat{S}_{1z}\hat{S}_{2z} + \hat{S}_{1+}\hat{S}_{2-} + \hat{S}_{1-}\hat{S}_{2+},$$

и повышающие (понижающие) операторы меняют проекции моментов соответствующих функций так, что суммарная проекция остаётся неизменной. Наша задача состоит в нахождении собственных функций операторов  $\hat{J}_z$ ,  $\hat{\mathbf{J}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{S}}_1^2$  и  $\hat{\mathbf{S}}_2^2$ . Эти функции являются линейной комбинацией функций (93):

$$|J, M\rangle = \sum_{|m|\leq S_1, |M-m|\leq S_2} C_{S_1, m; S_2, M-m}^{J, M} |S_1, m\rangle |S_2, M-m\rangle, \quad (94)$$

где  $C_{S_1, m; S_2, M-m}^{J, M}$  называются коэффициентами Клебша — Гордана. Полный спин  $J$ , как мы увидим ниже, меняется в пределах  $|S_1 - S_2| \leq J \leq S_1 + S_2$ . Функции  $|J, M\rangle$  удовлетворяют соотношению ортогональности

$$\langle J', M' | J, M \rangle = \delta_{J, J'} \delta_{M, M'}.$$

Число функций (94) равно

$$\begin{aligned} N &= \sum_{J=|S_1-S_2|}^{S_1+S_2} (2J+1) = 2 \frac{(S_1+S_2+|S_1-S_2|)(S_1+S_2-|S_1-S_2|+1)}{2} + \\ &+ (S_1+S_2-|S_1-S_2|+1) = (2S_1+1)(2S_2+1), \end{aligned}$$

т. е. совпадает с числом функций (93). Таким образом, формула (94) представляет собой переход от одного ортогонального базиса к другому. Следовательно,  $C_{S_1, m; S_2, M-m}^{J, M}$  является унитарной матрицей перехода. В действительности, используя произвольность выбора общей фазы волновых функций с

данным  $J$  и разными  $M$ , можно сделать коэффициенты Клебша — Гордана вещественными, что говорит о том, что матрица  $C_{S_1, m_1; S_2, M-m}^{J, M}$  является ортогональной. Поэтому

$$|S_1, m_1\rangle |S_2, m_2\rangle = \sum_{J=|S_1-S_2|, J \geq |m_1+m_2|}^{S_1+S_2} C_{S_1, m_1; S_2, m_2}^{J, m_1+m_2} |J, m_1+m_2\rangle. \quad (95)$$

Существует несколько методов вычисления коэффициентов Клебша — Гордана.

1. Рассмотрим состояние с наибольшей проекцией момента. Оно всего одно

$$|S_1 + S_2, S_1 + S_2\rangle = |S_1, S_1\rangle |S_2, S_2\rangle.$$

Подействуем на левую и правую части этого уравнения понижающим оператором  $J_- = S_{1-} + S_{2-}$ , используя равенство

$$J_- |J, J\rangle = \sqrt{2J} |J, J-1\rangle.$$

В результате получаем

$$\begin{aligned} |S_1 + S_2, S_1 + S_2 - 1\rangle &= \sqrt{\frac{S_1}{S_1 + S_2}} |S_1, S_1 - 1\rangle |S_2, S_2\rangle + \\ &+ \sqrt{\frac{S_2}{S_1 + S_2}} |S_1, S_1\rangle |S_2, S_2 - 1\rangle. \end{aligned} \quad (96)$$

Продолжая действовать понижающим оператором  $J_-$ , получаем все состояния  $|S_1 + S_2, M\rangle$ . Построим теперь состояние, ортогональное к  $|S_1 + S_2, S_1 + S_2 - 1\rangle$ , но с той же проекцией  $S_1 + S_2 - 1$ . Очевидно, это состояние можно записать как

$$\begin{aligned} |S_1 + S_2 - 1, S_1 + S_2 - 1\rangle &= \sqrt{\frac{S_2}{S_1 + S_2}} |S_1, S_1 - 1\rangle |S_2, S_2\rangle - \\ &- \sqrt{\frac{S_1}{S_1 + S_2}} |S_1, S_1\rangle |S_2, S_2 - 1\rangle. \end{aligned} \quad (97)$$

Действуя уже на обе части этого уравнения оператором  $J_-$ , получаем все состояния  $|S_1 + S_2 - 1, M\rangle$ . Функцию  $|S_1 + S_2 - 2, S_1 + S_2 - 2\rangle$  можно получить, если воспользоваться условием ортогональности к  $|S_1 + S_2, S_1 + S_2 - 2\rangle$  и  $|S_1 + S_2 - 1, S_1 + S_2 - 2\rangle$ , после чего мы действуем на эту функцию оператором  $J_-$  и получаем все состояния  $|S_1 + S_2 - 2, M\rangle$ , и т. д.

Пример  $S_1 = S_2 = 1/2$ :

$$\begin{aligned} |1, 1\rangle &= |1/2, 1/2\rangle_1 |1/2, 1/2\rangle_2, \\ |1, 0\rangle &= \sqrt{\frac{1}{2}} |1/2, -1/2\rangle_1 |1/2, 1/2\rangle_2 + \sqrt{\frac{1}{2}} |1/2, 1/2\rangle_1 |1/2, -1/2\rangle_2, \end{aligned}$$

$$|0, 0\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}}|1/2, -1/2\rangle_1 |1/2, 1/2\rangle_2 - \sqrt{\frac{1}{2}}|1/2, 1/2\rangle_1 |1/2, -1/2\rangle_2.$$

Состояния  $|J, -M\rangle$  получаются из состояния  $|J, M\rangle$  изменением знака всех проекций.

Пример  $S_1 = 3/2, S_2 = 1/2$ :

$$\begin{aligned} |2, 2\rangle &= |3/2, 3/2\rangle |1/2, 1/2\rangle, \\ |2, 1\rangle &= \frac{\sqrt{3}}{2}|3/2, 1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle + \frac{1}{2}|3/2, 3/2\rangle |1/2, -1/2\rangle, \\ |2, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|3/2, -1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|3/2, 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle, \\ |1, 1\rangle &= \frac{1}{2}|3/2, 1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2}|3/2, 3/2\rangle |1/2, -1/2\rangle, \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|3/2, -1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|3/2, 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle. \end{aligned}$$

Когда складывают одинаковые спины  $S_1 = S_2 = S$ , то функции с суммарными спинами  $2S, 2S-2, 2S-4 \dots$  являются симметричными относительно перестановки  $1 \leftrightarrow 2$ , а функции с суммарными спинами  $2S-1, 2S-3, 2S-5 \dots$  являются антисимметричными относительно перестановки  $1 \leftrightarrow 2$ .

2. Представьте себе, что мы хотим сложить спины  $S_1 = 2$  и  $S_2 = 1$ , но нас интересуют не все функции, а только  $|1, 0\rangle$ . Тогда предыдущий метод не является удобным, и мы поступим по-другому. Запишем общий вид функции  $|1, 1\rangle$ :

$$|1, 1\rangle = a|2, 2\rangle |1, -1\rangle + b|2, 1\rangle |1, 0\rangle + c|2, 0\rangle |1, 1\rangle.$$

Подействуем на левую и правую часть этого уравнения повышающим оператором  $J_+$  и приравняем результат к нулю. В результате получаем уравнения

$$a + \sqrt{2}b = 0, \quad b + \sqrt{3}c = 0, \quad a^2 + b^2 + c^2 = 1.$$

Решая уравнения, получаем

$$|1, 1\rangle = \sqrt{\frac{3}{5}}|2, 2\rangle |1, -1\rangle - \sqrt{\frac{3}{10}}|2, 1\rangle |1, 0\rangle + \sqrt{\frac{1}{10}}|2, 0\rangle |1, 1\rangle.$$

Действуя уже на эту функцию понижающим оператором, находим

$$|1, 0\rangle = \sqrt{\frac{3}{10}}|2, 1\rangle |1, -1\rangle - \frac{2}{\sqrt{10}}|2, 0\rangle |1, 0\rangle + \sqrt{\frac{3}{10}}|2, -1\rangle |1, 1\rangle.$$

3. Электрон в атоме водорода характеризуется орбитальным моментом  $l$  и спином  $S = 1/2$ . Полный момент  $J$  может равняться  $J = l \pm 1/2$  для  $l \neq 0$  и  $J = 1/2$  для  $l = 0$ . Состояние с определённым полным  $J$  и  $J_z = M$  называется сферическим спинором и обозначается  $\Omega_{J,l,M}$ :

$$\begin{aligned}\Omega_{l+1/2,l,M} &= a |l, M - 1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle + b |l, M + 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle = \\ &= \begin{pmatrix} a Y_{l, M-1/2}(\theta, \varphi) \\ b Y_{l, M+1/2}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}, \\ \Omega_{l-1/2,l,M} &= b |l, M - 1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle - a |l, M + 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle = \\ &= \begin{pmatrix} b Y_{l, M-1/2}(\theta, \varphi) \\ -a Y_{l, M+1/2}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}, \quad \int \Omega_{J,l,M}^+ \Omega_{J,l,M} \sin \theta d\theta d\varphi = 1.\end{aligned}$$

Вычислим коэффициенты  $a$  и  $b$ . Для этого умножим левую и правую часть сферического спинора  $\Omega_{l+1/2,l,M}$  на оператор

$$\hat{J}^2 = \hat{l}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{l}_z \hat{S}_z + \hat{l}_+ \hat{S}_- + \hat{l}_- \hat{S}_+.$$

Решая уравнение

$$\sqrt{l+1/2-M} a = \sqrt{l+1/2+M} b, \quad a^2 + b^2 = 1,$$

окончательно получаем

$$\begin{aligned}\Omega_{l+1/2,l,M} &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+1/2+M} Y_{l, M-1/2}(\theta, \varphi) \\ \sqrt{l+1/2-M} Y_{l, M+1/2}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}, \\ \Omega_{l-1/2,l,M} &= \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \sqrt{l+1/2-M} Y_{l, M-1/2}(\theta, \varphi) \\ -\sqrt{l+1/2+M} Y_{l, M+1/2}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

4. Рассмотрим два электрона, у которых угол между направлениями спинов равен  $\theta$ . Надо найти вероятность того, что суммарный спин системы равен единице и равен нулю. Первый способ решения задачи следующий. Направим ось  $z$  вдоль спина первого электрона. Тогда

$$\begin{aligned}\psi_1 &= \chi_+, \quad \psi_2 = \cos(\theta/2) \chi_+ + \sin(\theta/2) \chi_-, \\ \Psi &= \psi_1 \psi_2 = \cos(\theta/2) |1, 1\rangle + \sin(\theta/2) \frac{|1, 0\rangle + |0, 0\rangle}{\sqrt{2}}.\end{aligned}$$

Поэтому

$$\begin{aligned}W_1 &= \cos^2(\theta/2) + \frac{1}{2} \sin^2(\theta/2) = \frac{1}{4} (3 + \cos \theta), \\ W_0 &= 1 - W_1 = \frac{1}{4} (1 - \cos \theta).\end{aligned}$$

Второй способ состоит в следующем. Рассмотрим среднее  $\langle \Psi | \hat{\mathbf{J}}^2 | \Psi \rangle$ . Используем соотношения  $\langle J, M | \hat{\mathbf{J}}^2 | J, M \rangle = J(J+1)$  и

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{\mathbf{J}}^2 | \Psi \rangle &= \sum_{J,M} \langle \Psi | \hat{\mathbf{J}}^2 | J, M \rangle \langle J, M | \Psi \rangle = \sum_{J,M} J(J+1) |\langle J, M | \Psi \rangle|^2 = \\ &= \sum_{J,M} J(J+1) w_{J,M} = \sum_J J(J+1) W_J, \quad W_J = \sum_M w_{J,M}. \end{aligned}$$

Поэтому

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{\mathbf{J}}^2 | \Psi \rangle &= 2W_1 = \langle \Psi | \hat{\mathbf{S}}_1^2 + \hat{\mathbf{S}}_2^2 + 2\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_2 | \Psi \rangle = \frac{3}{4} + \frac{3}{4} + \frac{1}{2} \cos \theta \Rightarrow \\ \Rightarrow W_1 &= \frac{1}{4} (3 + \cos \theta). \end{aligned}$$

### 13.1. Векторная теорема

Коммутационные соотношения некоторого оператора  $\hat{B}$  с оператором углового момента определяют преобразование  $\hat{B}$  при поворотах. Так, скалярный оператор  $\hat{C}$  коммутирует с  $\hat{\mathbf{J}}$ :

$$[\hat{C}, \hat{\mathbf{J}}] = 0.$$

**Задача 13.1.** Покажите, что

$$\langle J, M | \hat{C} | J', M' \rangle = Q(J) \delta_{M,M'} \delta_{J,J'},$$

где  $Q(J)$  не зависит от  $M$ . Для этого рассмотрите матричные элементы  $\langle J, M | [\hat{C}, \hat{J}_z] | J', M' \rangle$ ,  $\langle J, M | [\hat{C}, \hat{\mathbf{J}}^2] | J', M' \rangle$ ,  $\langle J, M | \hat{J}_- \hat{C} \hat{J}_+ | J, M \rangle$  и используйте эрмитовость оператора  $\hat{\mathbf{J}}$ , а также соотношение  $(\hat{J}_-)^+ = \hat{J}_+$ .

Для векторных операторов  $\hat{\mathbf{A}}$  имеем

$$[\hat{A}_i, \hat{J}_j] = i\epsilon_{ijk} \hat{A}_k.$$

**Задача 13.2.** Напишите, чему равен коммутатор компонент оператора углового момента  $\hat{J}_i$  с компонентами тензорного оператора  $\hat{T}_{jk}$ .

Рассмотрим задачу вычисления матричного элемента

$$\mathcal{A} = \langle J, M | \hat{\mathbf{A}} | J, M' \rangle,$$

причём матричный элемент диагонален по  $J$ , но не обязательно диагонален по  $M$ . Для решения этой задачи удобно использовать так называемую векторную теорему. Рассмотрим сначала эвристический вывод этой теоремы.



Он основан на том соображении, что вектор  $\mathbf{A}$  должен быть пропорционален вектору  $\langle J, M | \hat{\mathbf{J}} | J, M' \rangle$ . Поэтому

$$\begin{aligned} \langle J, M | \hat{\mathbf{A}} | J, M' \rangle &= \langle J, M | \frac{\hat{\mathbf{J}} (\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{J}})}{\hat{\mathbf{J}}^2} | J, M' \rangle = \\ &= \frac{\langle J, M | (\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{J}}) | J, M \rangle}{J(J+1)} \langle J, M | \hat{\mathbf{J}} | J, M' \rangle, \end{aligned} \quad (98)$$

где мы учли, что  $(\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{J}})$  является скалярным оператором относительно поворотов, т. е.  $[\hat{\mathbf{J}}, (\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{J}})] = 0$ . Строгое доказательство теоремы основано на использовании тождества (докажите)

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{A}}]] = 2(\hat{\mathbf{J}}^2 \hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{J}}^2) - 4\hat{\mathbf{J}} (\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{J}}). \quad (99)$$

В качестве примера рассмотрим такую задачу. Две частицы со спинами  $S_1$  и  $S_2$  находятся в состоянии с полным спином  $J$ . Надо найти  $\langle J, M | \hat{\mathbf{S}}_1 | J, M' \rangle$ . Имеем

$$\langle J, M | \hat{\mathbf{S}}_1 | J, M' \rangle = \frac{\langle J, M | (\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}) | J, M \rangle}{J(J+1)} \langle J, M | \hat{\mathbf{J}} | J, M' \rangle.$$

Осталось вычислить матричный элемент  $\langle J, M | (\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}) | J, M \rangle$ . Для этого используем преобразование

$$\hat{\mathbf{S}}_2 = \hat{\mathbf{J}} - \hat{\mathbf{S}}_1 \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathbf{S}}_2^2 = \hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{S}}_1^2 - 2(\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}). \quad (100)$$

Поэтому

$$\langle J, M | (\hat{\mathbf{S}}_1 \cdot \hat{\mathbf{J}}) | J, M \rangle = \frac{1}{2} [J(J+1) + S_1(S_1+1) - S_2(S_2+1)]. \quad (101)$$

Заметим, что при  $S_1 = S_2$

$$\langle J, M | \hat{\mathbf{S}}_1 | J, M' \rangle = \frac{1}{2} \langle J, M | \hat{\mathbf{J}} | J, M' \rangle.$$

Поэтому магнитный момент позитрония равен нулю. Напомним, позитроний — водородоподобный атом, состоящий из электрона и позитрона, которые имеют спины  $1/2$ , одинаковые массы и противоположные по знаку электрические заряды, оператор магнитного момента позитрония равен  $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \mu_B(\boldsymbol{\sigma}_1 - \boldsymbol{\sigma}_2)$ .

Наши эвристические соображения могут быть обобщены для решения большого количества разнообразных задач. Рассмотрим, например, матричный элемент  $\langle l, M | (3n_i n_j - \delta_{ij}) | l, M' \rangle$ , который возникает при вычислении квадрупольного момента системы, здесь  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$  и  $l$  — орбитальный момент. Наш матричный элемент должен быть пропорционален матричному элементу

симметричного бесследового тензорного оператора второго ранга, построенного из оператора орбитального момента. Имеем

$$\begin{aligned} \langle l, M | (3n_i n_j - \delta_{ij}) | l, M' \rangle = \\ = A(l) \langle l, M | \left( \hat{l}_i \hat{l}_j + \hat{l}_j \hat{l}_i - \frac{2}{3} l(l+1) \delta_{ij} \right) | l, M' \rangle. \end{aligned} \quad (102)$$

Для того чтобы найти коэффициент  $A(l)$ , умножим обе части уравнения (102) на матричный элемент  $\langle l, M'' | \hat{l}_i | l, M \rangle$  и просуммируем по  $M$  от  $-l$  до  $l$ , воспользовавшись соотношением

$$\sum_{M=-l}^l \langle l, M'' | \hat{l}_i | l, M \rangle \langle l, M | = \langle l, M'' | \hat{l}_i.$$

С учётом того, что  $\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{l}} = 0$  и

$$\begin{aligned} \hat{l}_i \hat{l}_j \hat{l}_i = \hat{l}_j \hat{\mathbf{l}}^2 + [\hat{l}_i, \hat{l}_j] \hat{l}_i = \hat{l}_j \hat{\mathbf{l}}^2 + i \epsilon_{ijk} \hat{l}_k \hat{l}_i = \hat{l}_j \hat{\mathbf{l}}^2 + \\ + i \epsilon_{ijk} \left[ \frac{\hat{l}_k \hat{l}_i + \hat{l}_i \hat{l}_k}{2} + \frac{\hat{l}_k \hat{l}_i - \hat{l}_i \hat{l}_k}{2} \right] = \hat{l}_j \hat{\mathbf{l}}^2 + \frac{1}{2} i \epsilon_{ijk} i \epsilon_{kia} \hat{l}_a = \hat{l}_j \hat{\mathbf{l}}^2 - \hat{l}_j. \end{aligned}$$

Приравнивая коэффициенты при  $\langle l, M | l_j | l, M \rangle$ , получаем уравнение

$$-1 = A(l) \left[ \frac{4}{3} l(l+1) - 1 \right] \Rightarrow A(l) = -\frac{3}{(2l-1)(2l+3)}.$$

Совершенно аналогичные соображения позволяют сделать вывод о том, что матричный элемент оператора квадрупольного момента частицы  $\hat{Q}_{ij}$  может быть выражен следующим образом через оператор  $\hat{\mathbf{S}}$  спина частицы:

$$\langle S, M | \hat{Q}_{ij} | S, M' \rangle = Q \langle S, M | \left[ \hat{S}_i \hat{S}_j + \hat{S}_j \hat{S}_i - \frac{2}{3} S(S+1) \delta_{ij} \right] | S, M' \rangle,$$

причём коэффициент  $Q$  не зависит от  $M$ . Для  $S = 1/2$  оператор

$$\hat{S}_i \hat{S}_j + \hat{S}_j \hat{S}_i - \frac{2}{3} S(S+1) \delta_{ij}$$

тождественно равен нулю, см. (84). Таким образом, мы приходим к важному выводу о том, что квадрупольный момент у частицы со спином  $1/2$  тождественно равен нулю, т. е. «сплющить» или «вытянуть» электрон, протон и нейтрон нельзя!

## 13.2. Правила отбора для тензорных операторов

Правила отбора говорят, какие матричные элементы отличны от нуля для данного оператора. Рассмотрим, например, векторный оператор. Если взять недиагональный матричный элемент  $\langle J, M | \dots | J' M' \rangle$  от операторов в левой и правой части уравнения (99), то мы получим уравнение

$$[J(J+1) - J'(J'+1)]^2 = 2[J(J+1) + J'(J'+1)],$$

где мы учли, что для  $J \neq J'$  матричный элемент  $\langle J, M | \hat{\mathbf{J}} (\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{J}}) | J' M' \rangle$  равен нулю, так как  $(\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{J}})$  — скалярный оператор. Полученное уравнение имеет решение только в случае  $J = J' \pm 1$ . Таким образом, правила отбора для векторного оператора  $\Delta J \equiv J - J' = 0, \pm 1$ . Аналогично, правило отбора для тензорного оператора второго ранга имеет вид  $\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$ . Если оператор обладает определённой чётностью одновременно с волновыми функциями, то работают также правила отбора по чётности. Например, интеграл

$$\int d\Omega Y_{l_3, m_3}^*(\theta, \varphi) Y_{l_2, m_2}(\theta, \varphi) Y_{l_1, m_1}(\theta, \varphi) \neq 0$$

только для  $l_3 = l_1 + l_2, l_3 = l_1 + l_2 - 2, \dots, l_3 = |l_1 - l_2|$  и  $m_3 = m_1 + m_2$ .

## 13.3. Система двух частиц

Рассмотрим систему двух частиц с массами  $m_1$  и  $m_2$ , электрическими зарядами  $e_1$  и  $e_2$  и спинами  $S_1$  и  $S_2$ . Перейдём от векторов  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$ , характеризующих положение частиц, к векторам

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{M_{tot}}, \quad M_{tot} = m_1 + m_2,$$

описывающим относительное движение и движение центра инерции. Тогда операторы импульса  $\hat{\mathbf{p}}_{1,2}$  равны

$$\hat{\mathbf{p}}_1 = -\hat{\mathbf{p}} + \frac{m_1}{M_{tot}} \hat{\mathbf{P}}, \quad \hat{\mathbf{p}}_2 = \hat{\mathbf{p}} + \frac{m_2}{M_{tot}} \hat{\mathbf{P}}, \quad \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla_{\mathbf{r}}, \quad \hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \nabla_{\mathbf{R}}.$$

Тогда оператор кинетической энергии системы равен

$$\hat{T} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M_{tot}}, \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{M_{tot}}.$$

Оператор магнитного момента в системе центра инерции равен

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{M}} &= \frac{\mu_{s1}}{S_1} \hat{\mathbf{S}}_1 + \frac{\mu_{s2}}{S_2} \hat{\mathbf{S}}_2 + \frac{e_1}{2m_1 c} [\mathbf{r}_1 \times \hat{\mathbf{p}}_1] + \frac{e_2}{2m_2 c} [\mathbf{r}_2 \times \hat{\mathbf{p}}_2] = \\ &= \frac{\mu_{s1}}{S_1} \hat{\mathbf{S}}_1 + \frac{\mu_{s2}}{S_2} \hat{\mathbf{S}}_2 + \frac{\hbar}{2M_{tot} c} \left( e_1 \frac{m_2}{m_1} + e_2 \frac{m_1}{m_2} \right) \hat{\mathbf{L}}, \quad \hat{\mathbf{L}} = \frac{1}{\hbar} [\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}]. \end{aligned}$$

Вычислим магнитный момент дейтрона (ядра дейтерия). Дейтрон состоит из протона и нейтрона с полным спином  $S = 1$  ( $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$ ) и полным моментом  $J = 1$  ( $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{L}}$ ). При этом орбитальный момент  $L$  может быть или  $L = 0$ , или  $L = 2$ . Орбитальный момент не сохраняется из-за так называемых тензорных сил, которые не описываются потенциалом вида  $U(r)$ . Таким образом, волновая функция  $\Psi$  дейтрона имеет вид

$$\Psi = a |J = 1, S = 1, L = 0, J_z = M\rangle + b |J = 1, S = 1, L = 2, J_z = M\rangle,$$

где  $a$  и  $b$  — некоторые числа,  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ . Состояние с  $L = 1$  не может входить в эту суперпозицию из-за сохранения чётности, которая равна  $(-1)^L$ . Напомним, что волновая функция дейтрона обладает определенной пространственной чётностью, равной  $+1$ .

Учитывая, что для  $S_1 = S_2$  выполняются равенства

$$\langle S, m | \mathbf{S}_1 | S, m' \rangle = \langle S, m | \mathbf{S}_2 | S, m' \rangle = \frac{1}{2} \langle S, m | \mathbf{S} | S, m' \rangle,$$

получаем выражение для оператора магнитного момента дейтрона:

$$\hat{\mathcal{M}}_d = (\mu_p + \mu_n) \hat{\mathbf{S}} + \frac{1}{2} \mu_N \hat{\mathbf{L}} = (\mu_p + \mu_n) \hat{\mathbf{J}} + (\mu_N/2 - \mu_p - \mu_n) \hat{\mathbf{L}},$$

где  $\mu_N$  — ядерный магнетон. Для вычисления матричного элемента оператора магнитного момента дейтрона, воспользуемся векторной теоремой

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \hat{\mathcal{M}}_d | \Psi \rangle &= \mu_d \langle J, J_z | \hat{\mathbf{J}} | J, J_z \rangle, \\ \mu_d &= \mu_p + \mu_n + |b|^2 (\mu_N/2 - \mu_p - \mu_n) \frac{\langle J, J_z | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{L}} | J, J_z \rangle}{J(J+1)}, \\ \langle J, J_z | \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{L}} | J, J_z \rangle &= \frac{1}{2} \langle J, J_z | (\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{S}}^2) | J, J_z \rangle = \\ &= \frac{1}{2} [J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)] = 3. \end{aligned} \tag{103}$$

Окончательно,

$$\mu_d = \mu_p + \mu_n + \frac{3}{2} |b|^2 (\mu_N/2 - \mu_p - \mu_n).$$

Используя экспериментальные значения  $\mu_p = 2,79 \mu_N$ ,  $\mu_n = -1,91 \mu_N$ ,  $\mu_d = 0,857 \mu_N$ , находим  $|b|^2 = 0,04$ . Эта величина является вероятностью найти дейтрон в состоянии с орбитальным моментом  $L = 2$ .

### 13.4. Каноническое квантование

Что означают слова «проквантовать систему»? Рассмотрим простейшую систему, состоящую из замкнутых между собой конденсатора с ёмкостью  $C$  и соленоида с индуктивностью  $L$ , сопротивлением пренебрежём. Надо определить уровни энергии в такой системе.

1. Определим координату. В данном случае координатой  $x$  является заряд  $Q$  на конденсаторе.
2. Найдём функцию Лагранжа. Для этого рассмотрим энергию системы. Энергия конденсатора равна  $Q^2/(2C)$  и она, очевидно, играет роль потенциальной энергии системы. Энергия соленоида равна  $L\dot{Q}^2/2$  и она играет роль кинетической энергии системы. Таким образом, лагранжиан  $\mathcal{L}$  равен

$$\mathcal{L} = \frac{L\dot{Q}^2}{2} - \frac{Q^2}{2C}.$$

3. Определим канонический импульс  $P$ :

$$P = \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\dot{Q}} = L\dot{Q}.$$

4. Гамильтониан — это функция  $P\dot{Q} - \mathcal{L}$ , выраженная через канонический импульс и координату:

$$H = \frac{P^2}{2L} + \frac{Q^2}{2C}.$$

5. Заменяем импульс и координату на оператор импульса и оператор координаты. Получаем

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2L} + \frac{\hat{Q}^2}{2C}.$$

6. Постулируем, что

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = -i\hbar.$$

7. В данном случае в результате мы имеем гамильтониан гармонического осциллятора, у которого  $m = L$ , а  $m\omega^2 = 1/C$ , т. е.  $\omega = 1/\sqrt{LC}$ . Окончательно, энергия  $LC$ -цепочки равна

$$E_n = \frac{\hbar}{\sqrt{LC}} (n + 1/2), \quad n = 0, 1, \dots$$

## РАЗДЕЛ 14. КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И ИНТЕГРАЛЫ ПО ТРАЕКТОРИЯМ

Рассмотрим следующую одномерную временную задачу. Пусть в нулевой момент времени волновая функция частицы, которая находится в потенциале  $U(x)$ , равна  $\Psi(x)$ . Надо найти амплитуду вероятности  $\mathcal{M}$  обнаружить частицу в точке  $X$  в момент времени  $t$ . Имеем

$$\begin{aligned}\mathcal{M} &= \langle X | \exp(-i\hat{H}t/\hbar) | \Psi \rangle = \int dY \langle X | \exp(-i\hat{H}t/\hbar) | Y \rangle \langle Y | \Psi \rangle = \\ &= \int dY G(X, Y|t) \Psi(Y), \quad G(X, Y|t) = \langle X | \exp(-i\hat{H}t/\hbar) | Y \rangle,\end{aligned}\tag{104}$$

где  $\hat{H} = \hat{p}^2/(2m) + U(x)$  — гамильтониан. Мы воспользовались соотношением полноты

$$\int dY |Y\rangle\langle Y| = 1.$$

Таким образом, для того, чтобы решить задачу для произвольной функции  $\Psi(x)$  достаточно вычислить функцию  $G(X, Y|t)$ . Для этого разобьём интервал времени  $t$  на  $N \gg 1$  маленьких интервалов  $\tau = t/N$  и воспользуемся соотношением полноты:

$$\begin{aligned}G(X, Y|t) &= \int dx_1 dx_2 \dots dx_{N-1} \langle X | \exp(-i\hat{H}\tau/\hbar) | x_{N-1} \rangle \times \\ &\times \langle x_{N-1} | \exp(-i\hat{H}\tau/\hbar) | x_{N-2} \rangle \langle x_{N-2} | \exp(-i\hat{H}\tau/\hbar) | x_{N-3} \rangle \dots \times \\ &\times \langle x_1 | \exp(-i\hat{H}\tau/\hbar) | Y \rangle.\end{aligned}\tag{105}$$

Для маленького интервала времени  $\tau$  амплитуда  $\langle x_{k+1} | \exp(-i\hat{H}\tau/\hbar) | x_k \rangle$  заметно отлична от нуля только при близких значениях  $x_{k+1}$  и  $x_k$ . Поэтому с точностью  $\mathcal{O}(\tau^2)$

$$\begin{aligned}\langle x_{k+1} | \exp(-i\hat{H}\tau/\hbar) | x_k \rangle &\approx \langle x_{k+1} | \exp\left[-i\frac{\hat{p}^2}{2m}\tau/\hbar\right] | x_k \rangle \times \\ &\times \exp\left[-iU\left(\frac{x_{k+1} + x_k}{2}\right)\tau/\hbar\right].\end{aligned}\tag{106}$$

Далее, используя соотношение полноты, получаем

$$\begin{aligned}\langle x_{k+1} | \exp\left[-i\frac{\hat{p}^2}{2m}\tau/\hbar\right] | x_k \rangle &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \langle x_{k+1} | \exp\left[-i\frac{\hat{p}^2}{2m}\tau/\hbar\right] | p \rangle \langle p | x_k \rangle = \\ &= \int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[-\frac{p^2\tau}{2m} + (x_{k+1} - x_k)p\right]\right\} = \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\tau}} \exp\left\{\frac{i\tau}{\hbar}\left[\frac{m}{2}\left(\frac{x_{k+1} - x_k}{\tau}\right)^2\right]\right\}.\end{aligned}$$

Отсюда находим

$$G(X, Y|t) = \int \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\tau}} \prod_{k=1}^{N-1} \left[ \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\tau}} dx_k \right] \times \\ \times \exp \left\{ \frac{i\tau}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{k+1} - x_k}{\tau} \right)^2 - U \left( \frac{x_{k+1} + x_k}{2} \right) \right] \right\}, \quad (107)$$

где  $x_0 = Y$ ,  $x_N = X$ . Положим  $k\tau = t'$  и  $x_k \equiv x(t')$ . Тогда при  $\tau \rightarrow 0$  получим

$$\frac{x_{k+1} - x_k}{\tau} = \dot{x}(t'), \quad \frac{x_{k+1} + x_k}{2} = x(t'), \\ \tau \sum_{k=0}^{N-1} \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{k+1} - x_k}{\tau} \right)^2 - U \left( \frac{x_{k+1} + x_k}{2} \right) \right] = \\ = \int_0^t dt' \left[ \frac{m\dot{x}^2(t')}{2} - U(x(t')) \right] = \int_0^t dt' L = S, \quad (108)$$

где действие  $S$  является функционалом от  $x(t')$ , а  $L = \frac{m\dot{x}^2}{2} - U(x)$  — функция Лагранжа. Окончательно,

$$G(X, Y|t) = \int \mathcal{D}x \exp \left( \frac{iS}{\hbar} \right), \\ \mathcal{D}x = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\tau}} \prod_{k=1}^{N-1} \left[ \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i\tau}} dx_k \right], \quad (109) \\ \tau = t/N, \quad x_0 = Y, \quad x_N = X.$$

Эта формула функционального интегрирования (интеграла по траекториям) легко обобщается на случай нескольких степеней свободы и является основой для вычислений в квантовой теории поля. Подробное изложение подхода функционального интегрирования в квантовой механике можно найти в монографии [9].

## РАЗДЕЛ 15. ЦЕНТРАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОЕ ПОЛЕ

### 15.1. Радиальное уравнение Шредингера

Рассмотрим бесспиновую частицу в потенциале  $U(r)$ . Уравнение Шредингера для частицы с энергией  $E$  в сферических координатах имеет вид

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + \frac{\hbar^2 \hat{l}^2}{2mr^2} + U(r) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}),$$

где радиальная часть лапласиана равна

$$\Delta_r = \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r}.$$

Представим волновую функцию  $\Psi(\mathbf{r})$  в виде  $\Psi(\mathbf{r}) = Y_{l,m}(\theta, \varphi) R(r)$ . Радиальная волновая функция  $R(r)$  удовлетворяет уравнению

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r) \right] R(r) = ER(r).$$

Радиальная функция локализованных состояний удовлетворяет условию нормировки

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

Выясним, каким образом оператор  $\Delta_r$  связан с оператором квадрата радиального импульса  $\hat{p}_r$ . Оператор  $\hat{p}_r$  должен быть эрмитов, т. е. удовлетворять соотношению

$$\int_0^\infty dr r^2 R_2^*(r) [\hat{p}_r R_1(r)] = \int_0^\infty dr r^2 [\hat{p}_r R_2(r)]^* R_1(r).$$

Этому соотношению не удовлетворяет оператор  $-i\hbar\partial/\partial r$ . С помощью интегрирования по частям легко проверить, что оператором радиального импульса является

$$\hat{p}_r = -i\hbar \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r = -i\hbar \left[ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right].$$

При этом

$$[\hat{p}_r, \hat{r}] = -i\hbar.$$

Действительно,

$$\int_0^\infty dr r R_2^*(r) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial r} r R_1(r) \right) = \int_0^\infty dr \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial r} r R_2(r) \right)^* r R_1(r).$$



Поэтому  $\hat{p}_r^2 = -\hbar^2 \Delta_r$  и радиальное уравнение Шредингера можно записать в виде

$$\left[ \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r) \right] R(r) = ER(r). \quad (110)$$

Перейдём в стационарном радиальном уравнении (110) от функции  $R(r)$  к функции  $\chi(r) = r R(r)$ , которая удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \chi''(r) + \left[ \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + U(r) \right] \chi(r) = E\chi(r) \quad (111)$$

и граничному условию  $\chi(0) = 0$ . Уравнение (111) с этим граничным условием является одномерным уравнением Шредингера с бесконечной стенкой в начале координат. Если предположить, что уравнение (111) имеет два независимых решения  $\chi_1(r)$  и  $\chi_2(r)$  с одной и той же энергией  $E$ , то, действуя как при выводе соотношения (28), получим уравнение

$$\chi_2(r)\chi_1'(r) - \chi_1(r)\chi_2'(r) = \text{const}. \quad (112)$$

Из граничного условия при  $r = 0$  следует, что константа равна нулю и вырождение отсутствует. Кроме того, функцию  $\chi(r)$  можно считать вещественной. Поэтому радиальный ток для стационарного трёхмерного уравнения Шредингера равен нулю как для локализованного состояния, так и для функций непрерывного спектра. Напомним, что ток связан с градиентом фазы комплексной волновой функции, см. (6). Кроме того, для частицы с определённым значением  $l_z = M$  ток имеет только азимутальную компоненту  $j_\varphi = |\Psi|^2 \hbar M / (m r)$ .

Обсудим асимптотическое поведение решений радиального уравнения Шредингера на малых и больших расстояниях. При малых  $r$  имеем степенное поведение решений. Подставив  $\chi = r^\alpha$  и считая, что  $r^2 U(r) \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow 0$ , получаем  $\alpha(\alpha - 1) = l(l + 1)$ . Имеем два решения,  $\alpha = l + 1$  и  $\alpha = -l$ . Решение  $\alpha = -l$  является сингулярным и его нужно отбросить. Таким образом, при малых  $r$  асимптотика радиальной функции  $R(r) = \chi(r)/r \sim r^l$ .

Асимптотика радиальной волновой функции на больших расстояниях зависит от того, стремится ли  $U(r)$  к нулю при больших  $r$  или нет. Если  $U(r) \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$ , то  $\chi(r) \sim \exp(-\kappa r)$  для локализованных состояний ( $E < 0$  и  $\kappa = \sqrt{2m|E|}/\hbar$ ) и  $\chi(r) \sim \sin(kr + \phi)$  для функций непрерывного спектра ( $E > 0$ ,  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$  и  $\phi$  — некоторое число, зависящее от вида потенциала). Для функций  $R(r)$  имеем  $R(r) \sim \exp(-\kappa r)/r$  для локализованных состояний и  $R(r) \sim \sin(kr + \phi)/r$  для функций непрерывного спектра. Если  $U(r)$  не стремится к нулю при больших  $r$ , то универсальной асимптотики при больших  $r$  не существует.

## 15.2. Двухмерный случай уравнения Шредингера

В некотором смысле, соотношение  $\hat{p}_r^2 = -\hbar^2 \Delta_r$  является случайным. Рассмотрим, например, двухмерное пространство и частицу в потенциале  $U(\rho)$ , где  $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$ . Уравнение Шредингера в цилиндрических координатах имеет вид:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_\rho + \frac{\hbar^2 \hat{l}_z^2}{2m\rho^2} + U(\rho) \right] \Psi(\boldsymbol{\rho}) = E\Psi(\boldsymbol{\rho}),$$

где радиальная часть лапласиана равна

$$\Delta_\rho = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho}.$$

Представим волновую функцию  $\Psi(\boldsymbol{\rho})$  в виде  $\Psi(\boldsymbol{\rho}) = \exp(iM\varphi) R(\rho)$ . Радиальная волновая функция  $R(\rho)$  удовлетворяет уравнению

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_\rho + \frac{\hbar^2 M^2}{2m\rho^2} + U(\rho) \right] R(\rho) = ER(\rho).$$

Радиальная функция локализованных состояний удовлетворяет условию нормировки

$$\int_0^\infty d\rho \rho |R(\rho)|^2 = 1.$$

Из требования эрмитовости оператора радиального импульса  $\hat{p}_\rho$

$$\int_0^\infty d\rho \rho R_2^*(\rho) [\hat{p}_\rho R_1(\rho)] = \int_0^\infty d\rho \rho [\hat{p}_\rho R_2(\rho)]^* R_1(\rho)$$

следует, что

$$\hat{p}_\rho = -i\hbar \frac{1}{\sqrt{\rho}} \frac{\partial}{\partial \rho} \sqrt{\rho} = -i\hbar \left[ \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{2\rho} \right].$$

Поэтому

$$\hat{p}_\rho^2 = -\hbar^2 \frac{1}{\sqrt{\rho}} \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \sqrt{\rho} = -\hbar^2 \left[ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{4\rho^2} \right] = -\hbar^2 \Delta_\rho + \frac{\hbar^2}{4\rho^2} \neq -\hbar^2 \Delta_\rho,$$

и радиальное уравнение Шредингера в цилиндрических координатах можно записать в виде

$$\left[ \frac{\hat{p}_\rho^2}{2m} + \frac{\hbar^2 (M^2 - 1/4)}{2m\rho^2} + U(\rho) \right] R(\rho) = ER(\rho). \quad (113)$$

Заметим, что в двухмерном случае можно перейти к одномерному уравнению Шредингера с потенциалом с бесконечной стенкой в начале координат

с помощью замены  $\chi(\rho) = \sqrt{\rho} R(\rho)$ . В результате  $\chi(\rho)$  удовлетворяет уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \chi''(\rho) + \left[ \frac{\hbar^2 (M^2 - 1/4)}{2m\rho^2} + U(\rho) \right] \chi(\rho) = E\chi(\rho), \quad (114)$$

с граничным условием  $\chi(0) = 0$ .

### 15.3. Свободное движение

Рассмотрим радиальное уравнение Шредингера при нулевом потенциале:

$$\left[ -\Delta_r + \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R(r) = k^2 R(r), \quad k^2 = 2mE/\hbar^2,$$

где  $E > 0$ . Сделаем замену функции  $R(r) = f(r)/\sqrt{r}$ , в результате для функции  $f(r)$  получаем

$$f'' + \frac{1}{r} f' + \left[ k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2} \right] f(r) = 0.$$

Регулярным решением этого уравнения является функция Бесселя, а именно  $f(r) \propto J_{l+1/2}(kr)$ . В результате для нормированного решения радиального уравнения Шредингера получаем

$$\begin{aligned} R_{kl}(r) &= 2k j_l(kr), \quad j_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+1/2}(x), \\ \int_0^\infty dr r^2 R_{kl}(r) R_{k'l}(r) &= 2\pi \delta(k - k'), \\ \int_0^\infty dk R_{kl}(r) R_{kl}(r') &= \frac{2\pi}{rr'} \delta(r - r'). \end{aligned} \quad (115)$$

Заметим, что радиальные функции с разными  $l$  между собой не ортогональны, так как являются собственными функциями разных радиальных гамильтонианов. Полные же волновые функции с разными  $l$  между собой ортогональны за счёт угловых частей.

Функции  $j_l(x)$  называются сферическими функциями Бесселя. Они выражаются через элементарные функции, например:

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \quad j_2(x) = \left( \frac{3}{x^3} - \frac{1}{x} \right) \sin x - \frac{3 \cos x}{x^2}.$$

Сферические функции Бесселя имеют асимптотики

$$j_l(x) = \frac{1}{x} \sin(x - l\pi/2) \quad \text{при} \quad x \gg 1,$$

$$j_l(x) = \frac{x^l}{(2l+1)!!} \quad \text{при } x \ll 1.$$

Так как коэффициент при  $\delta$ -функции в соотношении ортогональности определяется большими расстояниями, то для вычисления этого коэффициента достаточно знать асимптотику радиальной волновой функции на больших расстояниях. Поэтому асимптотика радиальной волновой функции на больших расстояниях для ненулевого потенциала имеет вид

$$R_{kl}(r) = \frac{2}{r} \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l) \quad \text{при } kr \gg 1,$$

где  $\delta_l$  называется фазовым сдвигом. Фазовый сдвиг равен нулю при  $U(r) = 0$ .

## 15.4. Сферическая прямоугольная яма

Рассмотрим локализованные состояния с  $l = 0$  в потенциале  $U(r) = -U_0$  при  $r < a$  и  $U(r) = 0$  при  $r > a$ . Решение уравнения для  $\chi(r)$  имеет вид (с учётом граничного условия  $\chi(0) = 0$ ):

$$\begin{aligned} \chi(r) &= \sin(\varkappa r) \quad \text{при } r < a, \quad \varkappa = \sqrt{2m(U_0 - |E|)}/\hbar, \\ \chi(r) &= A \exp(-kr) \quad \text{при } r > a, \quad k = \sqrt{2m|E|}/\hbar. \end{aligned}$$

Используя непрерывность функции и производной при  $r = a$ ,

$$\sin(\varkappa a) = A \exp(-ka), \quad \varkappa \cos(\varkappa a) = -kA \exp(-ka)$$

и разделив одно уравнение на другое, получим

$$\varkappa \operatorname{ctg}(\varkappa a) = -k.$$

Переходя к переменной  $y = \varkappa a$  и используя соотношение  $ka = \sqrt{G^2 - y^2}$ , где  $G = \sqrt{2mU_0 a^2}/\hbar$ , получаем трансцендентное уравнение

$$y \operatorname{ctg} y = -\sqrt{G^2 - y^2}.$$

Из этого уравнения следует, что локализованные состояния появляются при  $G > \pi/2$ , т. е.  $U_0 > \pi^2 \hbar^2 / (8ma^2)$ . Таким образом, в трёхмерном случае в мелкой яме локализованных состояний нет. Напомним, что критерий мелкой ямы  $U_0 \ll \hbar^2 / (ma^2)$ .

Рассмотрим вопрос, при какой глубине ямы возникают локализованные состояния при произвольном  $l$ . При маленькой энергии имеем  $ka \ll 1$ . Следовательно, при  $E = 0$  мы можем искать решение в виде

$$R(r) = \frac{1}{\sqrt{\varkappa_0 r}} J_{l+1/2}(\varkappa_0 r) \quad \text{при } r < a, \quad \varkappa_0 = \sqrt{2mU_0}/\hbar,$$

$$R(r) = \frac{A}{r^{l+1}} \quad \text{при } r > a.$$

Используя непрерывность функции и производной при  $r = a$  и рекуррентное соотношение для функций Бесселя

$$J'_\nu(x) + \frac{\nu}{x} J_\nu(x) = J_{\nu-1},$$

получаем уравнение

$$j_{l-1}(\kappa_0 a) = 0.$$

В глубокой яме, т. е.  $U_0 \gg \hbar^2/(ma^2)$ , уровни энергии для произвольных  $l$  определяются уравнением  $j_l(\kappa a) = 0$ .

## 15.5. Двухмерная мелкая яма

Заметим, что уравнение (111) для функции  $\chi(r)$  в трёхмерном случае совпадает с уравнением (114) для функции  $\chi(\rho)$  в двухмерном случае при замене  $l(l+1) \rightarrow M^2 - 1/4$ , т. е.  $l \rightarrow |M| - 1/2$ . Поэтому, если найти аналитическое решение с энергией  $E(l, n)$ , то энергия для данного  $|M|$  будет равна  $E(|M| - 1/2, n)$ . Можно было бы подумать, что в мелкой яме в двухмерном случае тоже нет локализованного состояния, однако это не так. Причина в том, что для  $M = 0$  соответствующее значение  $l = -1/2$  и центробежный потенциал в уравнении (111) является потенциалом притяжения. В результате для мелкой ямы в двухмерном случае есть связанное состояние, отвечающее  $M = 0$ . Радиальное уравнение Шредингера для потенциала  $U(\rho) = -U_0\theta(a - \rho)$  в двухмерном случае для  $M = 0$  и  $E < 0$  имеет вид

$$R''(\rho) + \frac{1}{\rho} R'(\rho) + \frac{2m}{\hbar^2} [U_0\theta(a - \rho) - |E|] R(\rho) = 0.$$

Решение этого уравнения

$$\begin{aligned} R(\rho) &= J_0(\kappa\rho) \quad \text{при } \rho < a, \quad \kappa = \sqrt{2m(U_0 - |E|)}/\hbar, \\ R(\rho) &= A K_0(k\rho) \quad \text{при } \rho > a, \quad k = \sqrt{2m|E|}/\hbar, \end{aligned}$$

где  $J_0(x)$  — функция Бесселя, а  $K_0(x)$  — модифицированная функция Бесселя второго рода, или функция Макдональда. Эти функции имеют асимптотики

$$\begin{aligned} J_0(x) &= 1 - \frac{x^2}{4} + \dots, \quad K_0(x) = -\ln(x/2) - C \quad \text{при } x \ll 1, \\ J_0(x) &= \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos(x - \pi/4), \quad K_0(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} e^{-x} \quad \text{при } x \gg 1, \end{aligned}$$

где  $C = 0,5772\dots$  — постоянная Эйлера. Для мелкой ямы  $\kappa_0 a \ll 1$ ,  $k \ll \kappa_0$ , где  $\kappa_0 = \sqrt{2mU_0}/\hbar$ . Используя эти соотношения и непрерывность волновой функции и производной при  $\rho = a$ ,

$$1 = A [-\ln(ka/2) - C],$$

$$-\frac{\kappa_0^2 a}{2} = -\frac{A}{a},$$

находим энергию локализованного состояния для мелкой двухмерной ямы:

$$E = -\frac{2\hbar^2}{ma^2} \exp\left[-\frac{4}{\kappa_0^2 a^2} - 2C\right].$$

## 15.6. Трёхмерный гармонический осциллятор:

$$U(r) = m\omega^2 r^2/2$$

Перейдём от переменных  $r$  и  $E$  к безразмерным переменным  $y$  и  $\varepsilon$ :  $r = \sqrt{\hbar/(m\omega)} y$  и  $E = \hbar\omega \varepsilon$ . В этих переменных радиальное уравнение Шредингера для функции  $\chi(r) = rR(r)$  имеет вид:

$$-\frac{d^2}{dy^2} \chi + \frac{l(l+1)}{y^2} \chi + y^2 \chi = 2\varepsilon \chi.$$

Находим асимптотики:  $\chi \propto y^{l+1}$  при  $y \ll 1$ , и  $\chi \propto \exp(-y^2/2)$  при  $y \gg 1$ . Сделаем подстановку  $\chi(y) = y^{l+1} \exp(-y^2/2) F(y)$ . Функция  $F$  удовлетворяет следующему уравнению

$$F'' + 2\left(\frac{l+1}{y} - y\right) F' + (2\varepsilon - 2l - 3)F = 0.$$

Поскольку уравнение переходит в себя при замене  $y \rightarrow -y$  и  $F(0) \neq 0$ , то будем искать решение в виде степенного ряда по чётным степеням,  $F(y) = \sum_n c_n y^{2n}$ . Приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях  $y$ , найдем рекуррентное соотношение

$$c_{n+1} = \frac{4n + 2l + 3 - 2\varepsilon}{2(n+1)(2n+2l+3)} c_n.$$

Для того чтобы ряд оборвался, необходимо, чтобы

$$\varepsilon = 2N + l + 3/2,$$

где  $N$  — некоторое целое число. Если ряд не оборвётся, то при больших  $n$  рекуррентное соотношение будет  $c_{n+1} \approx c_n/(n+1)$ , а значит  $F \propto \exp(y^2)$  при  $y \gg 1$ . Следовательно, мы получаем экспоненциально растущее решение  $\psi \propto \exp(y^2/2)$ . Окончательно, спектр уровней энергии трёхмерного гармонического осциллятора имеет вид

$$E_N = \hbar\omega (2N + l + 3/2).$$

## 15.7. Кулоновский потенциал

Рассмотрим потенциал  $U(r) = -e^2/r$ . Так как этот потенциал является степенной функцией  $r$ , то в уравнении Шредингера можно перейти к безразмерным переменным  $r = a_B y$  и  $E = (e^2/a_B) \varepsilon$ , где  $a_B = \hbar^2/(me^2)$  — боровский радиус. В этих переменных радиальное уравнение Шредингера на функцию  $\chi(y)$  для локализованных состояний ( $\varepsilon < 0$ ) имеет вид

$$\chi''(y) + \left[ -\varkappa^2 + \frac{2}{y} - \frac{l(l+1)}{y^2} \right] \chi(y) = 0, \quad \varkappa = \sqrt{2|\varepsilon|}. \quad (116)$$

Находим асимптотики:  $\chi \propto y^{l+1}$  при  $y \ll 1$ , и  $\chi \propto \exp(-\varkappa y)$  при  $y \gg 1$ . Сделаем подстановку  $\chi(y) = y^{l+1} \exp(-\varkappa y) F(y)$ . Функция  $F$  удовлетворяет следующему уравнению

$$y F''(y) + 2(l+1 - \varkappa y) F'(y) + 2[1 - \varkappa(l+1)] F(y) = 0. \quad (117)$$

Подставляя  $F$  в уравнение в виде степенного ряда,  $F(y) = \sum_n c_n y^n$ , и приравнявая коэффициенты при одинаковых степенях  $y$ , находим рекуррентное соотношение

$$c_{n+1} = \frac{2[\varkappa(l+n+1) - 1]}{(n+1)(n+2l+2)} c_n.$$

Для того, чтобы ряд оборвался, необходимо, чтобы

$$\varkappa = \frac{1}{n_r + l + 1},$$

где  $n_r \geq 0$  — некоторое целое число, называемое радиальным квантовым числом. Если ряд не оборвётся, то при больших  $n$  рекуррентное соотношение будет  $c_{n+1} \approx 2\varkappa c_n/n$  или  $F \propto \exp(2\varkappa y)$ , т. е. мы придём к экспоненциально растущему решению  $\psi \propto \exp(\varkappa y)$ . Окончательно, спектр уровней энергии для кулоновского потенциала имеет вид

$$E_N = -\frac{me^4}{2\hbar^2 N^2}, \quad N = n_r + l + 1.$$

Число  $N$  называется главным квантовым числом. Мы видим, что в спектре существует вырождение: для данного  $N$  существуют  $N$  разных комбинаций  $n_r$  и  $l$ , удовлетворяющих уравнению  $n_r + l = N - 1$ . Каждая такая комбинация имеет степень вырождения по проекции углового момента  $l_z$ , равную  $2l + 1$ . Таким образом, количество состояний с данным уровнем энергии равно

$$\sum_{l=0}^{N-1} (2l+1) = 2 \frac{N(N-1)}{2} + N = N^2.$$

Для обозначения уровней энергии в кулоновском поле (термов) используется символ, состоящий из буквы и цифры перед буквой. Цифра равна главному

квантовому числу  $N$ , а буква соответствует орбитальному моменту:  $s$  ( $l = 0$ ),  $p$  ( $l = 1$ ),  $d$  ( $l = 2$ ),  $f$  ( $l = 3$ ),  $g$  ( $l = 4$ ),  $\dots$ . Поэтому спектр атома водорода выглядит следующим образом:  $\{1s\}$ ,  $\{2s, 2p\}$ ,  $\{3s, 3p, 3d\}$ ,  $\dots$ . В фигурных скобках указаны термы с одинаковой энергией.

Обсудим теперь вид радиальных волновых функций. Имеем

$$R_{Nl}(r) = \frac{y^l}{a_B^{3/2}} \mathcal{P}_{Nl}(y) \exp(-y/N), \quad y = r/a_B,$$

где  $\mathcal{P}_{Nl}(y)$  — полином степени  $N - l - 1$ . Например:

$$\mathcal{P}_{10}(y) = 2, \quad \mathcal{P}_{20}(y) = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - y/2), \quad \mathcal{P}_{21}(y) = \frac{1}{2\sqrt{6}}.$$

Заметим, что коэффициенты в этих полиномах можно найти из нормировки радиальных волновых функций и условия ортогональности радиальных волновых функций с одинаковыми  $l$  и различными  $N$ .

В кулоновском поле притяжения существует бесконечное число локализованных состояний, причём расстояние между соседними уровнями при увеличении  $N$  уменьшается как  $1/N^3$  (сгущение уровней).

## 15.8. Матричные элементы операторов в кулоновском поле

При решении задач атомной физики приходится вычислять матричные элементы различных операторов. Для этого часто можно воспользоваться приёмами, которые позволяют найти необходимые матричные элементы без вычисления интегралов с использованием явного вида волновых функций. Одним из таких приёмов является использование теоремы о дифференцировании энергии по параметру. Рассмотрим гамильтониан  $\hat{H}(\lambda)$ , который зависит от некоторого параметра  $\lambda$ , а также собственные функции  $\Psi$  состояний дискретного спектра этого гамильтониана и собственные значения  $E$ , которые, очевидно, также зависят от  $\lambda$ . Имеем

$$\begin{aligned} E &= \int d^3r \Psi^+ \hat{H} \Psi, \\ \frac{\partial}{\partial \lambda} E &= \int d^3r \left[ \frac{\partial}{\partial \lambda} \Psi^+ \right] \hat{H} \Psi + \int d^3r \Psi^+ \left[ \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{H} \right] \Psi + \int d^3r \Psi^+ \hat{H} \left[ \frac{\partial}{\partial \lambda} \Psi \right] = \\ &= E \frac{\partial}{\partial \lambda} \left[ \int d^3r \Psi^+ \Psi \right] + \int d^3r \Psi^+ \left[ \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{H} \right] \Psi = \int d^3r \Psi^+ \left[ \frac{\partial}{\partial \lambda} \hat{H} \right] \Psi. \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались эрмитовостью гамильтониана  $\hat{H}(\lambda)$ .



Для частицы в кулоновском поле притяжения возьмём в качестве параметра квадрат заряда  $e^2$ . Тогда

$$\langle \Psi | \left( -\frac{1}{r} \right) | \Psi \rangle = \frac{\partial}{\partial e^2} \left( -\frac{me^4}{2\hbar^2 N^2} \right) = -\frac{1}{a_B N^2},$$

или

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{a_B N^2}. \quad (118)$$

Возьмём теперь в качестве параметра массу  $m$ . Тогда

$$\langle \Psi | \left( -\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m^2} \right) | \Psi \rangle = \frac{\partial}{\partial m} \left( -\frac{me^4}{2\hbar^2 N^2} \right) = -\frac{e^4}{2\hbar^2 N^2},$$

или

$$\langle \hat{\mathbf{p}}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{a_B^2 N^2}.$$

В качестве ещё одного примера рассмотрим гамильтониан радиального уравнения Шредингера в кулоновском поле:

$$\hat{H}_r = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{r},$$

а в качестве параметра — орбитальный момент  $l$ . Тогда

$$\left\langle \Psi \left| \frac{\hbar^2(2l+1)}{2mr^2} \right| \Psi \right\rangle = \frac{\partial}{\partial l} \left( -\frac{me^4}{2\hbar^2(n_r + l + 1)^2} \right) = \frac{me^4}{\hbar^2 N^3},$$

следовательно,

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{1}{(l+1/2)N^3 a_B^2}. \quad (119)$$

Среднее значение  $\langle 1/r^3 \rangle$  для  $l \neq 0$  можно получить, используя соотношение  $\langle \Psi | [\hat{H}_r, \hat{p}_r] | \Psi \rangle = 0$ , где  $\Psi$  — собственная функция гамильтониана. Из этого соотношения следует, что

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \left\langle \frac{1}{l(l+1)a_B r^2} \right\rangle = \frac{1}{l(l+1)(l+1/2)N^3 a_B^3}. \quad (120)$$

Среднее значение произвольной степени  $r^k$  может быть вычислено из рекуррентного соотношения, которое следует из равенства

$$\langle \Psi | [\hat{H}_r, (r^{k+1} \hat{p}_r + \hat{p}_r r^{k+1})] | \Psi \rangle = 0.$$

Соответствующее рекуррентное соотношение имеет вид (получите):

$$\frac{(k+1)}{N^2} \left\langle \left( \frac{r}{a_B} \right)^k \right\rangle = (2k+1) \left\langle \left( \frac{r}{a_B} \right)^{k-1} \right\rangle + k \left[ \frac{k^2}{4} - \left( l + \frac{1}{2} \right)^2 \right] \left\langle \left( \frac{r}{a_B} \right)^{k-2} \right\rangle.$$

### 15.9. Потенциал $U(r) = -e^2/r - g/r^2$

Уровни энергии в этом потенциале могут быть получены из уровней энергии в кулоновском потенциале с помощью замены

$$l(l+1) - 2mg/\hbar^2 \rightarrow L(L+1) \quad \text{или} \quad L = -1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 - 2mg/\hbar^2}.$$

В результате для спектра локализованных состояний находим

$$E(n_r, l) = - \frac{me^4}{2\hbar^2 \left[ n_r + 1/2 + \sqrt{(l+1/2)^2 - 2mg/\hbar^2} \right]^2}. \quad (121)$$

Видно, что вырождение по орбитальному моменту  $l$  отсутствует (вырождение по проекции момента, конечно, сохраняется, как и для любого центрального поля). Существование вырождения как правило связано с наличием дополнительного закона сохранения. В случае кулоновского поля, вырождение связано с существованием оператора  $\hat{A}$ , который коммутирует с гамильтонианом и является квантовым обобщением вектора Рунге — Ленца:

$$\hat{A} = \frac{\hbar}{2m} \left( [\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{l}}] - [\hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{p}}] \right) - e^2 \frac{\mathbf{r}}{r}.$$

Формула (121) имеет смысл только при  $g < \hbar^2/(8m)$  (выражение под корнем положительно для  $l = 0$ ). Для  $g > \hbar^2/(8m)$  возникает явление падения на центр. Смысл этого явления можно прояснить с помощью соотношения неопределённостей. Представим себе волновой пакет с размером  $r_0 \ll a_B$ , локализованный вокруг точки  $r = 0$ . Тогда кинетическая энергия будет порядка  $T \sim \hbar^2/(mr_0^2)$ , а потенциальная  $U \sim -g/r_0^2$ . Тогда при  $g \gg \hbar^2/m$  суммарная энергия будет отрицательной и будет стремиться к  $-\infty$  при уменьшении  $r_0$ .

### 15.10. Электромагнитные поля в атоме

Характерное электрическое поле в атоме водорода

$$\mathcal{E} \sim \frac{|e|}{a_B^2} = 1,715 \cdot 10^7 \text{ СГС} = 5,14 \cdot 10^9 \text{ В/см}.$$

Характерное магнитное поле в атоме водорода

$$\mathcal{H} \sim \frac{v}{c} \frac{|e|}{a_B^2} = \alpha \frac{|e|}{a_B^2} = 1,25 \cdot 10^5 \text{ Гс},$$

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

Вычислим статический потенциал атома водорода:

$$\phi(\mathbf{r}) = |e| \left[ \frac{1}{r} - \int d^3r' \frac{|\psi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right], \quad (122)$$

где первое слагаемое отвечает вкладу ядра, а второе — вкладу электрона. Удобно воспользоваться производящей функцией полиномов Лежандра  $P_L(x)$ :

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \sum_{L=0}^{\infty} \left[ \theta(r - r') \frac{1}{r} \left(\frac{r'}{r}\right)^L + \theta(r' - r) \frac{1}{r'} \left(\frac{r}{r'}\right)^L \right] P_L(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}'), \quad (123)$$

где  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ ,  $\mathbf{n}' = \mathbf{r}'/r'$ . Для состояния с  $l = 0$  волновая функция  $\psi(\mathbf{r})$  не зависит от углов. С учётом того, что  $\int_{-1}^1 dx P_l(x) = 0$  для  $l \neq 0$ , вклад даёт только слагаемое с  $L = 0$  в (123), т. е.

$$\begin{aligned} \phi(r) &= |e| \left[ \frac{1}{r} - \frac{1}{r} \int_0^r dr' r'^2 R_{N0}^2(r') - \int_r^\infty dr' r' R_{N0}^2(r') \right] = \\ &= \frac{|e|}{r} \int_r^\infty dr' r' (r' - r) R_{N0}^2(r'), \end{aligned}$$

где мы учли нормировку радиальной волновой функции. Так как радиальная функция экспоненциально мала на больших расстояниях, то потенциал  $\phi(r)$  для  $l = 0$  также экспоненциально мал на больших расстояниях. В частности, для  $N = 1$  (основное состояние)

$$\phi(r) = |e| \left( \frac{1}{r} + \frac{1}{a_B} \right) \exp(-2r/a_B).$$

Рассмотрим теперь состояние с  $l = 1$ . В этом случае вклад, кроме  $L = 0$ , даёт слагаемое с  $L = 2$  в уравнении (123). Для  $l = 1$  угловую часть волновой функции можно записать в виде

$$Y_{1m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \mathbf{e}_m \cdot \mathbf{n}, \quad \mathbf{n} = \mathbf{r}/r,$$

где вектор  $\mathbf{e}_m$  зависит от проекции  $m$  углового момента,  $\mathbf{e}_m \cdot \mathbf{e}_m^* = 1$ . Вклад в интеграл по углам в формуле (122) дают только члены с  $L = 0$  и  $L = 2$  в сумме (123). Поэтому потенциал  $\phi(\mathbf{r})$  равен

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) &= \phi_0(r) + \phi_2(\mathbf{r}), \\ \phi_0(r) &= \frac{|e|}{r} \int_r^\infty dr' r' (r' - r) R_{N1}^2(r'), \\ \phi_2(\mathbf{r}) &= -\frac{3}{4\pi} \int d\Omega_{\mathbf{n}'} (\mathbf{e}_m \cdot \mathbf{n}') (\mathbf{e}_m^* \cdot \mathbf{n}') P_2(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') \times \\ &\times \frac{|e|}{r^3} \left[ \int_0^r dr' r'^4 R_{N1}^2(r') + \int_r^\infty \frac{dr'}{r'} (r'^5 - r^5) R_{N1}^2(r') \right]. \end{aligned} \quad (124)$$

Вычислим интеграл по углам:

$$\frac{3}{4\pi} \int d\Omega_{\mathbf{n}'} (\mathbf{e}_m \cdot \mathbf{n}') (\mathbf{e}_m^* \cdot \mathbf{n}') P_2(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') = \frac{1}{4\pi} e_m^a e_m^{*b} \int d\Omega_{\mathbf{n}'} (3n'^a n'^b - \delta^{ab}) P_2(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}').$$

Представим симметричный тензор второго ранга с нулевым следом в виде

$$\frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{\mathbf{n}'} (3n'^a n'^b - \delta^{ab}) P_2(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') = (3n^a n^b - \delta^{ab}) B,$$

где  $B$  — некоторая константа. Умножив левую и правую части этого равенства на  $n^a n^b$ , получим

$$B = \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_{\mathbf{n}'} \frac{[3(\mathbf{n}' \cdot \mathbf{n})^2 - 1]}{2} P_2(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}') = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dx P_2^2(x) = \frac{1}{5}.$$

В результате для  $\phi_2(\mathbf{r})$  находим

$$\begin{aligned} \phi_2(\mathbf{r}) = & -\frac{1}{5} (3|\mathbf{e}_m \cdot \mathbf{n}|^2 - 1) \times \\ & \times \frac{|e|}{r^3} \left[ \int_0^\infty dr' r'^4 R_{N1}^2(r') + \int_r^\infty \frac{dr'}{r'} (r'^5 - r^5) R_{N1}^2(r') \right]. \end{aligned} \quad (125)$$

При  $r \gg a_B$  вклад  $\phi_2(\mathbf{r}) \propto 1/r^3$ ,

$$\begin{aligned} \phi_2(\mathbf{r}) = & -\frac{|e|}{5r^3} (3|\mathbf{e}_m \cdot \mathbf{n}|^2 - 1) \int_0^\infty dr' r'^4 R_{N1}^2(r') = \\ = & -\frac{|e|a_B^2}{2r^3} N^2(N^2 - 1) (3|\mathbf{e}_m \cdot \mathbf{n}|^2 - 1). \end{aligned} \quad (126)$$

Он соответствует вкладу квадрупольного момента атома.

## РАЗДЕЛ 16. КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

### 16.1. Квазиклассическая волновая функция и условие применимости

Запишем одномерное стационарное уравнение Шредингера для частицы в потенциале  $U(x)$  в виде

$$\hbar^2 \psi''(x) = -\mathcal{P}^2(x) \psi(x), \quad \mathcal{P}(x) = \sqrt{2m[E - U(x)]}, \quad (127)$$

и выразим волновую функцию  $\psi(x)$  через функцию  $S(x)$ , имеющую размерность действия,

$$\psi(x) = \exp[iS(x)/\hbar].$$

Функция  $S(x)$  удовлетворяет уравнению

$$[S'(x)]^2 - i\hbar S''(x) = \mathcal{P}^2(x).$$

Будем искать решение этого уравнения, разлагая  $S(x)$  в ряд по постоянной Планка (квазиклассическое приближение),

$$S(x) = S_0(x) + \hbar S_1(x) + \dots$$

Приравнивая коэффициенты при нулевой и первой степени  $\hbar$ , получаем

$$[S'_0(x)]^2 = \mathcal{P}^2(x), \quad S'_1(x) = \frac{i}{2} \frac{S''_0(x)}{S'_0(x)} = \frac{i}{2} \frac{d}{dx} \ln S'_0(x).$$

Отсюда следует, что

$$S_0(x) = \pm \int^x dx' \mathcal{P}(x'), \quad S_1(x) = \frac{i}{2} \ln \mathcal{P}(x).$$

Для волновой функции в квазиклассическом приближении получаем (с точностью до постоянного коэффициента)

$$\psi(x) = \frac{\exp[\pm i \int^x dx' \mathcal{P}(x')/\hbar]}{\sqrt{\mathcal{P}(x)}}.$$

Эта формула справедлива как при  $E > U(x)$  (действительные значения  $\mathcal{P}(x)$ ), так и для  $E < U(x)$  (мнимые значения  $\mathcal{P}(x)$ ). Квазиклассическое приближение справедливо, если

$$\left| \frac{\hbar S''_0(x)}{[S'_0(x)]^2} \right| \ll 1 \quad \Rightarrow \quad \left| \frac{\hbar}{\mathcal{P}^2(x)} \frac{d}{dx} \mathcal{P}(x) \right| \ll 1. \quad (128)$$

Это неравенство можно переписать в виде

$$\left| \frac{d}{dx} \lambda(x) \right| \ll 1, \quad \lambda(x) = \frac{\hbar}{\mathcal{P}(x)},$$

где  $\lambda(x)$  — квазиклассическая длина волны частицы. Последнее неравенство эквивалентно условию того, что изменение длины волны на размере порядка длины волны мало по сравнению с самой длиной волны:  $|\lambda(x)\lambda'(x)| \ll |\lambda(x)|$ . Условие применимости квазиклассического приближения (128) можно также переписать в виде

$$\left| \frac{\hbar m U'(x)}{\mathcal{P}^3(x)} \right| \ll 1.$$

Отсюда видно, что в точке поворота, в которой  $E = U(x_0)$  (т. е.  $\mathcal{P}(x_0) = 0$ ), при условии  $U'(x_0) \neq 0$ , квазиклассическое приближение не применимо. Если вблизи точки поворота записать  $E - U(x) \approx -(x - x_0)U'(x_0)$ , то для условия применимости квазиклассического приближения вблизи точки поворота найдём

$$|x - x_0| \gg \left( \frac{\hbar^2}{m |U'(x_0)|} \right)^{1/3}.$$

## 16.2. Квантование Бора — Зоммерфельда

Рассмотрим точку поворота  $x = a$ , так, что  $E > U(x)$  при  $x > a$  и  $E < U(x)$  при  $x < a$ . Будем считать, что на достаточном расстоянии от точки поворота применимо квазиклассическое приближение. Как известно, существуют два линейно независимых решения дифференциального уравнения второго порядка (в данном случае речь идёт об уравнении Шредингера). Возникает вопрос, какая линейная комбинация осциллирующих решений в классически разрешённой области соответствует экспоненциально затухающему решению в классически запрещённой области. Это соответствие называется правилом сшивки. Существуют несколько способов получить ответ на этот вопрос. Один из способов основан на том, что вблизи точки поворота  $U(x) \approx U(a) + U'(a)(x - a)$ , а решение в линейном потенциале известно аналитически. Другой способ основан на использовании аналитического продолжения квазиклассического решения  $\psi(x)$  по комплексной переменной  $x$ .

Рассмотрим второй способ. Пусть, для простоты, точка поворота находится при  $x = 0$  и классически-запрещённая область находится при  $x > 0$ . Вблизи точки поворота  $E - U(x) \approx -U'(0)x$  и при  $x > 0$ ,

$$\psi(x) = \frac{\exp \left[ - \int_0^x dx' \sqrt{2mU'(0)x'/\hbar} \right]}{[2mU'(0)x]^{1/4}} = \frac{\exp \left[ - \frac{2\sqrt{2mU'(0)}}{3\hbar} x^{3/2} \right]}{[2mU'(0)x]^{1/4}}. \quad (129)$$

При  $x < 0$  квазиклассическую волновую функцию можно записать в виде суперпозиции

$$\psi(x) = C_1 \frac{\exp \left[ i \frac{2\sqrt{2mU'(0)}}{3\hbar} (-x)^{3/2} \right]}{[2mU'(0)(-x)]^{1/4}} + C_2 \frac{\exp \left[ -i \frac{2\sqrt{2mU'(0)}}{3\hbar} (-x)^{3/2} \right]}{[2mU'(0)(-x)]^{1/4}}, \quad (130)$$

где  $C_1$  и  $C_2$  — некоторые константы. Используя функцию (129), мы не можем перейти от положительных  $x$  к отрицательным  $x$  вдоль вещественной оси и получить функцию (130), так как при  $x = 0$  квазиклассическое приближение не работает. Для того, чтобы обойти эту трудность, рассмотрим квазиклассическую функцию на дуге  $x = \rho \exp(i\varphi)$  в комплексной плоскости переменной  $x$ , считая  $\rho \gg \left( \hbar^2 / (mU'(0)) \right)^{1/3}$ . Положив  $\phi = \pi - \delta$ , где  $\delta \ll 1$ , имеем

$$\exp(3i\varphi/2) \approx -3\delta/2 - i \quad \exp(i\varphi/4) \approx \exp(i\pi/4),$$

считая  $\delta \sqrt{mU'(0)} \rho^{3/2} / \hbar \gg 1$  и сравнивая с (130), получаем  $C_1 = \exp(-i\pi/4)$ . Вторым член в (130) в этой области будет экспоненциально мал, а именно,  $\propto \exp[-\delta \sqrt{mU'(0)} \rho^{3/2} / \hbar]$ . Для того чтобы найти  $C_2$ , положим  $\phi = -\pi + \delta$ , где  $\delta \ll 1$ . Сравнивая в этой области (129) и (130), получим  $C_2 = \exp(+i\pi/4)$ . В результате получаем окончательный результат

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{|\mathcal{K}(x)|}} \exp \left[ - \left| \int_a^x dx' \mathcal{K}(x') \right| \right] \quad \text{при } E < U(x) \rightarrow \\ & \rightarrow \frac{2}{\sqrt{\mathcal{K}(x)}} \sin \left[ \left| \int_a^x dx' \mathcal{K}(x') \right| + \frac{\pi}{4} \right] \quad \text{при } E > U(x), \end{aligned} \quad (131)$$

где  $\mathcal{K}(x) = \mathcal{P}(x)/\hbar$ . Эта формула справедлива и в случае, когда классически разрешённая область находится левее точки поворота  $a$ , и в случае, когда классически разрешённая область находится правее точки поворота.

Рассмотрим потенциал  $U(x)$ , в котором классически разрешённая область находится между двумя точками поворота  $a$  и  $b$ , причём  $a < b$ . Используя правило сшивки (131) для обеих точек поворота, приравнявая функции в промежутке  $a < x < b$

$$\sin \left( \int_x^b dx' \mathcal{K}(x') + \frac{\pi}{4} \right) = \sin \left( \int_a^x dx' \mathcal{K}(x') + \frac{\pi}{4} \right),$$

и используя тождество

$$\int_x^b dx' \mathcal{K}(x') = \int_a^b dx' \mathcal{K}(x') - \int_a^x dx' \mathcal{K}(x'),$$

получаем

$$\int_a^b dx \mathcal{P}(x) = \pi \hbar (n + 1/2), \quad n = 0, 1, \dots$$

Это равенство можно также переписать в виде

$$\oint dx \mathcal{P}(x) = 2 \int_a^b dx \mathcal{P}(x) = 2\pi\hbar(n + 1/2), \quad (132)$$

где интеграл по замкнутому контуру равен площади фазового пространства, ограниченного классической траекторией, соответствующей одному периоду колебаний классической частицы. Это равенство можно интерпретировать как квантование площади фазового пространства, причём площадь одной ячейки равна  $2\pi\hbar$ . В трёхмерном случае надо говорить о квантовании объёма фазового пространства, причём объём одной ячейки равен  $(2\pi\hbar)^3$ . Уравнение (132) называется условием квантования Бора — Зоммерфельда. Оно справедливо при  $n \gg 1$ , но учёт  $1/2$  в правой части этого условия не является превышением точности. Это значит, что отбрасывание  $1/2$  увеличивает отличие приближённого квазиклассического результата от точного.

Если классически-разрешённая область ограничена бесконечной стенкой в точке  $x = a$ , что соответствует граничному условию  $\psi(a) = 0$ , то квазиклассическое приближение становится справедливым, начиная с точки  $x = a$ . В этом случае

$$\psi(x) = \frac{2}{\sqrt{\mathcal{K}(x)}} \sin \left[ \int_a^x dx' \mathcal{K}(x') \right] \quad \text{при } x > a. \quad (133)$$

В результате условие квантования Бора — Зоммерфельда приобретает вид

$$\int_a^b dx \mathcal{P}(x) = \pi\hbar(n + 3/4), \quad n = 0, 1, \dots$$

Уравнение (132) позволяет легко находить уровни энергии в квазиклассическом приближении. Рассмотрим, например, потенциал  $U(x) = F|x|$ . Точками поворота являются  $\pm x_0$ , где  $x_0 = E/F$ . Имеем

$$\begin{aligned} \int_{-x_0}^{x_0} dx \sqrt{2m(E - F|x|)} &= 2x_0\sqrt{2mE} \int_0^1 dx \sqrt{1-x} = \\ &= \frac{4}{3F} E^{3/2}\sqrt{2m} = \pi\hbar(n + 1/2) \Rightarrow E_n = \left( \frac{3\pi\hbar(n + 1/2)F}{4\sqrt{2m}} \right)^{2/3}. \end{aligned}$$

В качестве ещё одного примера рассмотрим гармонический осциллятор,  $U(x) = m\omega^2 x^2/2$ . В этом потенциале  $x_0 = \sqrt{2E/(m\omega^2)}$  и

$$\begin{aligned} \int_{-x_0}^{x_0} dx \sqrt{2m(E - m\omega^2 x^2/2)} &= 2x_0\sqrt{2mE} \int_0^1 dx \sqrt{1-x^2} = \\ &= 2x_0\sqrt{2mE} \frac{\pi}{4} = \frac{\pi E}{\omega} = \pi\hbar(n + 1/2) \Rightarrow E_n = \hbar\omega(n + 1/2). \end{aligned}$$



Мы видим, что для гармонического осциллятора условие квантования Бора — Зоммерфельда даёт точный ответ для любых  $n$ .

Используя (132), можно оценить расстояние между соседними уровнями энергии  $\delta E_n = E_{n+1} - E_n \approx \partial E_n / \partial n$ . Для этого возьмём производную по  $n$  от обеих частей уравнения (132):

$$\frac{\partial E_n}{\partial n} \oint \frac{m}{\mathcal{P}(x)} dx = \frac{\partial E_n}{\partial n} \oint \frac{dx}{v(x)} = T_{cl} \frac{\partial E_n}{\partial n} = 2\pi\hbar \Rightarrow \delta E_n = \frac{2\pi\hbar}{T_{cl}} = \hbar\omega_{cl},$$

где  $v(x) = \mathcal{P}(x)/m$  — классическая скорость частицы,  $T_{cl}$  — период колебаний,  $\omega_{cl} = 2\pi/T_{cl}$  — циклическая частота колебаний.

Если количество локализованных состояний большое,  $N_0 \gg 1$ , то это количество можно оценить, используя условие (132). Положив в нём  $E = 0$ , получим

$$N_0 = \frac{1}{\pi\hbar} \int_{\Gamma} dx \sqrt{-2mU(x)},$$

где интеграл берётся по области  $U(x) < 0$ . Если мы имеем яму с характерной глубиной  $\sim U_0$  и характерной шириной  $\sim a$ , то  $N_0 \sim (ma^2U_0/\hbar^2)^{1/2} \gg 1$ . Для того чтобы число локализованных состояний было конечным, необходимо, чтобы потенциальная энергия  $U(x)$  при больших  $|x|$  убывала быстрее, чем  $1/x^2$ .

### 16.3. Нормировка квазиклассической волновой функции локализованного состояния

В квазиклассическом приближении основной вклад в нормировку даёт классически разрешённая область, в которой волновую функцию можно представить в виде

$$\psi(x) = \frac{N}{\sqrt{\mathcal{P}(x)}} \sin \left[ \frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' \mathcal{P}(x') + \frac{\pi}{4} \right],$$

где  $N$  — нормировочный множитель. Тогда

$$\begin{aligned} \int_a^b dx \frac{N^2}{\mathcal{P}(x)} \sin^2 \left[ \frac{1}{\hbar} \int_a^x dx' \mathcal{P}(x') + \frac{\pi}{4} \right] &\approx \frac{N^2}{2m} \int_a^b \frac{dx}{v(x)} = \frac{N^2 T_{cl}}{4m} = 1 \Rightarrow \\ \Rightarrow N &= \sqrt{\frac{4m}{T_{cl}}}, \end{aligned}$$

где мы провели усреднение по быстрым (за счёт множителя  $1/\hbar$ ) осцилляциям, заменив  $\sin^2[\dots]$  на  $1/2$ . Тогда вероятность  $\Delta W$  найти частицу в интервале  $\Delta x$  равна

$$\Delta W = |\psi(x)|^2 \Delta x = \frac{N^2 \Delta x}{2m v(x)} = \frac{2}{T_{cl}} \frac{\Delta x}{v(x)} = \frac{\Delta t}{(T_{cl}/2)}.$$

Таким образом, в квазиклассическом приближении вероятность пропорциональна интервалу времени, проводимому частицей в данной области, при данном  $\Delta x$  она обратно-пропорциональна скорости частицы.

## 16.4. Правило квантования Бора — Зоммерфельда в центрально-симметричном поле

В радиальном уравнении Шредингера на функцию  $\chi(r) = rR(r)$ ,

$$-\chi''(r) = \frac{2m}{\hbar^2}[E - U_l(r)]\chi(r),$$

эффективный потенциал равен  $U_l(r) = U(r) + \hbar^2 l(l+1)/(2mr^2)$ , и при  $l \neq 0$  центробежный потенциал нарушает условие применимости (128) квазиклассического приближения при малых  $r$ . В результате возникает необходимость модифицировать условие квантования Бора — Зоммерфельда. Для этого введём новую переменную  $x$  и функцию  $F(x)$ , определяемые соотношениями  $r = e^x$  и  $\chi = e^{x/2} F(x)$ . В результате  $x$  меняется в области  $-\infty < x < \infty$ , а функция  $F(x)$  удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\begin{aligned} -F''(x) &= \frac{2m}{\hbar^2}[\mathcal{E} - V(x)]F(x), \\ \mathcal{E} &= -\frac{\hbar^2}{2m}(l + 1/2)^2, \quad V(x) = e^{2x}[U(e^x) - E]. \end{aligned}$$

К этому уравнению уже можно применить условие квантования Бора — Зоммерфельда

$$\oint dx \sqrt{2m[\mathcal{E} - V(x)]} = 2\pi\hbar(n_r + 1/2),$$

где  $n_r$  — радиальное квантовое число. Сделав теперь в интеграле замену переменных  $x = \ln r$ , окончательно получаем

$$\begin{aligned} \oint dr \sqrt{2m[E - \tilde{U}_l(r)]} &= 2\pi\hbar(n_r + 1/2), \\ \tilde{U}_l(r) &= U(r) + \frac{\hbar^2(l + 1/2)^2}{2mr^2}, \end{aligned} \tag{134}$$

т. е. в эффективном потенциале  $U_l(r)$  произошла замена  $l(l+1) \rightarrow (l+1/2)^2$ . В случаях кулоновского поля  $U(r) = -e^2/r$  и поля трёхмерного гармонического осциллятора  $U(r) = m\omega^2 r^2/2$ , полученное условие квантования даёт точный ответ для любых значений  $n_r$  и  $l$ .

В случае центрально-симметричного поля количество уровней в яме отличается от количества состояний, так как каждый уровень вырожден по

проекции момента  $2l + 1$  раз. Количество  $N_l$  уровней энергии с орбитальным моментом  $l$  совпадает с количеством состояний в одномерной задаче радиального движения. Поэтому  $N_l$  можно оценить по формуле

$$N_l = \frac{1}{2\pi\hbar} \oint dr \sqrt{2m[-\tilde{U}_l(r)]} \theta(-\tilde{U}_l(r)) ,$$

где интеграл берётся по области  $\tilde{U}_l(r) < 0$ .

После этого, заменяя суммирование по  $l$  на интегрирование, находим полное количество  $N_{tot}$  состояний в потенциале  $U(r)$ :

$$\begin{aligned} N_{tot} &= \sum_l (2l + 1) N_l \approx \int dl (2l + 1) N_l = \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int d(l + 1/2)^2 \oint dr \sqrt{2m[-\tilde{U}_l(r)]} \theta(-\tilde{U}_l(r)) = \\ &= \frac{2}{3\pi\hbar^3} \int dr r^2 [-2mU(r)]^{3/2} \theta(-U(r)) . \end{aligned} \quad (135)$$

Здесь мы поменяли местами порядок интегрирования по  $l$  и  $r$  и явно взяли интеграл по  $l$ . Формулу (135) можно получить другим способом:

$$\begin{aligned} N_0 &= \iint \frac{d^3r d^3p}{(2\pi\hbar)^3} = \int \frac{4\pi r^2 dr}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4\pi}{3} [-2mU(r)]^{3/2} \theta(-U(r)) = \\ &= \frac{2}{3\pi\hbar^3} \int dr r^2 [-2mU(r)]^{3/2} \theta(-U(r)) . \end{aligned} \quad (136)$$

Для того, чтобы количество уровней и состояний в яме было конечным, необходимо, чтобы потенциальная энергия  $U(r)$  на больших расстояниях стремилась к нулю быстрее, чем  $1/r^2$ .

## 16.5. Подбарьерное прохождение

Рассмотрим одномерную задачу рассеяния на потенциальном барьере ( $U(x) > 0$ ,  $U(x) \rightarrow 0$  при  $|x| \rightarrow \infty$ ). Будем считать, что  $E < \max[U(x)]$  (подбарьерное прохождение) и барьер достаточно широкий и высокий, чтобы коэффициент прохождения был мал. Имеем две точки поворота,  $a$  и  $b$ , причём  $a < b$  и волна падает из  $-\infty$ . При  $x > b$  квазиклассическая волновая функция имеет вид

$$\psi(x) = \frac{B}{\sqrt{\mathcal{K}(x)}} \exp \left[ i \int_b^x dx' \mathcal{K}(x') \right] \quad \text{при } x > b .$$

Нам понадобится ещё одно правило сшивки:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{\mathcal{K}(x)}} \exp \left[ i \int_b^x dx' \mathcal{K}(x') \right] \quad \text{при } x > b \rightarrow \\ & \rightarrow \frac{1}{\sqrt{|\mathcal{K}(x)|}} \exp \left[ \int_x^b dx' |\mathcal{K}(x')| - i\pi/4 \right] \quad \text{при } x < b. \end{aligned} \quad (137)$$

С учётом того, что коэффициент прохождения мал, квазиклассическую волновую функцию при  $x < a$  можно записать в виде

$$\psi(x) = \frac{2i}{\sqrt{\mathcal{K}(x)}} \sin \left[ \int_x^a dx' \mathcal{K}(x') + \frac{\pi}{4} \right] \quad \text{при } x < a.$$

Приравнявая функции в промежутке  $a < x < b$  в двух правилах сшивки (131) и (137), находим коэффициент  $B$ :

$$B = \exp \left[ - \int_a^b dx |\mathcal{K}(x)| + 3i\pi/4 \right].$$

В результате для коэффициента прохождения  $T = |B|^2$  находим

$$T = \exp \left[ -2 \int_a^b dx |\mathcal{K}(x)| \right]. \quad (138)$$

Оценим, используя эту формулу, время жизни квазистационарного состояния в потенциале  $U(r) = \frac{\alpha}{r} \theta(r - r_0)$ . Поскольку трёхмерную задачу можно свести к одномерной задаче со стенкой в начале координат, вероятность распада в единицу времени с орбитальным моментом  $l = 0$  можно оценить как

$$\dot{W} \sim \frac{1}{T_{cl}} \exp \left[ -\frac{2}{\hbar} \int_{r_0}^{\alpha/E} dr \sqrt{2m(\alpha/r - E)} \right],$$

где  $T_{cl} \sim 2r_0/v$ ,  $E = mv^2/2$  и  $\alpha/r_0 \gg E$ . Взяв интеграл, получаем

$$\dot{W} \sim \frac{1}{T_{cl}} \exp \left[ -\frac{2\pi\alpha}{\hbar v} \right], \quad \tau = \frac{1}{\dot{W}} \sim T_{cl} \exp \left[ \frac{2\pi\alpha}{\hbar v} \right] \gg T_{cl},$$

так как условие применимости квазиклассического приближения записывается как  $\alpha/(\hbar v) \gg 1$ . Полученная формула качественно согласуется с эмпирическим законом Гейгера — Неттола (1911 г.) для альфа-распада

$$\log \tau = C_1 + \frac{C_2}{\sqrt{E}},$$

где  $C_{1,2}$  — некоторые константы,  $E$  — энергия альфа-частиц.

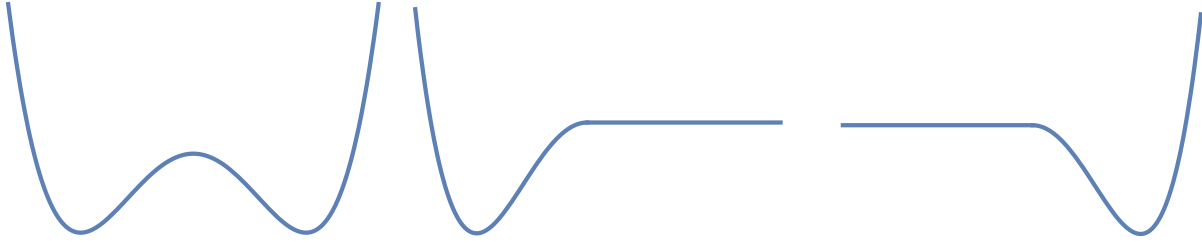


Рис. 8. Потенциалы (слева направо)  $U(x)$ ,  $U_l(x)$  и  $U_r(x)$

## 16.6. Двойная яма

Рассмотрим симметричный потенциал  $U(x) = U(-x)$ , потенциал  $U_l(x)$ , совпадающий с  $U(x)$  при  $x < 0$ , и потенциал  $U_r(x)$ , совпадающий с  $U(x)$  при  $x > 0$ . Эти потенциалы изображены на рис. 8. Будем считать, что частица находится в высоковозбуждённом состоянии с энергией  $E$ , но высота барьера  $U(0) \gg E$  и ширина барьера такова, что коэффициент прохождения из левой ямы в правую очень мал. Очевидно, что уровни энергии в потенциале  $U_l(x)$  совпадают с уровнями энергии в потенциале  $U_r(x)$ . Предположим, что мы знаем какую-то энергию  $E_0 \ll U(0)$  в этих потенциалах и соответствующие волновые функции  $\psi_l(x)$  и  $\psi_r(x) = \psi_l(-x)$ . Задача состоит в нахождении энергии  $E$  в потенциале  $U(x)$ .

Запишем при  $x < 0$  уравнения Шредингера для  $\psi_l(x)$  и  $\psi(x)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi_l''(x) + U(x)\psi_l(x) = E_0\psi_l(x), \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x). \quad (139)$$

Волновые функции локализованных состояний в симметричном потенциале  $U(x)$  бывают или симметричными, или антисимметричными. Так как коэффициент прохождения под барьером мал, то нормированные соответствующие волновые функции можно записать в виде (ниже мы учитываем, что для всех  $x$  выполнено  $|\psi_l(x)\psi_r(x)| \ll 1$ )

$$\psi_s(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_l(x) + \psi_r(x)], \quad \psi_a(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_l(x) - \psi_r(x)].$$

Умножим обе части первого уравнения (139) на  $\psi(x)$ , а второго — на  $\psi_l(x)$ , и вычтем из первого уравнения второе, получаем:

$$\frac{d}{dx}[\psi(x)\psi_l'(x) - \psi_l(x)\psi'(x)] = \frac{2m}{\hbar^2}(E - E_0)\psi(x)\psi_l(x).$$

Проинтегрируем обе части этого уравнения по  $x$  от  $-\infty$  до нуля. С учётом того, что

$$\psi_l(0) = \psi_r(0), \quad \psi_s(0) = \sqrt{2}\psi_l(0), \quad \psi_s'(0) = 0, \quad \psi_a(0) = 0, \quad \psi_a'(0) = \sqrt{2}\psi_l'(0),$$

получаем

$$E_s - E_0 = \frac{\hbar^2}{m} \psi_l(0) \psi_l'(0), \quad E_a - E_0 = -\frac{\hbar^2}{m} \psi_l(0) \psi_l'(0).$$

Пусть точки поворота на барьере равны  $-a$  и  $a$ . Используя нормированную квазиклассическую волновую функцию  $\psi_l(x)$  при  $x < -a$  и правило сшивки (131), находим, что при  $-a < x < 0$

$$\psi_l(x) = \sqrt{\frac{m}{T_{cl}}} \frac{1}{\sqrt{|\mathcal{P}(x)|}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^x dx' |\mathcal{P}(x')| \right].$$

Поэтому

$$\begin{aligned} \psi_l(0) &= \sqrt{\frac{m}{T_{cl}}} \frac{1}{\sqrt{|\mathcal{P}(0)|}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^0 dx' |\mathcal{P}(x')| \right], \\ \psi_l'(0) &= -\sqrt{\frac{m}{T_{cl}}} \frac{\sqrt{|\mathcal{P}(0)|}}{\hbar} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^0 dx' |\mathcal{P}(x')| \right], \\ E_s - E_0 &= -\epsilon, \quad E_a - E_0 = \epsilon, \quad \epsilon = \frac{\hbar}{T_{cl}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a dx' |\mathcal{P}(x')| \right], \end{aligned}$$

где  $T_{cl}$  — классический период колебаний в левой (правой) яме. Заметим, что с учётом условия применимости квазиклассического приближения (128), при вычислении производной  $\psi_l'(0)$  необходимо дифференцировать только экспоненту. Видно, что расщепление уровней является экспоненциально малым, а экспоненциальный фактор является не коэффициентом прохождения через барьер, а квадратным корнем из коэффициента прохождения.

Рассмотрим следующую задачу. Пусть при  $t = 0$  волновая функция равна  $\Psi(x, 0) = \psi_l(x)$  (т. е. частицу посадили в левую яму). Надо найти  $\Psi(x, t)$ . Так как

$$\psi_l(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_s(x) + \psi_a(x)],$$

то

$$\begin{aligned} \Psi_l(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ e^{-iE_s t/\hbar} \psi_s(x) + e^{-iE_a t/\hbar} \psi_a(x) \right] = \\ &= \frac{e^{-iE_0 t/\hbar}}{\sqrt{2}} \left[ e^{i\epsilon t/\hbar} \psi_s(x) + e^{-i\epsilon t/\hbar} \psi_a(x) \right] = \\ &= e^{-iE_0 t/\hbar} [\cos(\epsilon t/\hbar) \psi_l(x) + i \sin(\epsilon t/\hbar) \psi_r(x)]. \end{aligned}$$

Таким образом, вероятность  $W_l(t)$  найти частицу в левой яме и вероятность  $W_r(t)$  найти частицу в правой яме равны

$$W_l(t) = \cos^2(\epsilon t/\hbar), \quad W_r(t) = \sin^2(\epsilon t/\hbar).$$

Из этих формул видно, что частица осциллирует между двумя ямами с периодом  $\tau = \pi \hbar/\epsilon$ .

## РАЗДЕЛ 17. РЕЛЯТИВИСТСКАЯ КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА

Волновые уравнения квантовой механики, описывающие релятивистские частицы, зависят от спина этих частиц. Эти уравнения не выводятся, а постулируются. Однако, можно привести некоторые аргументы, почему они имеют тот или иной вид. Ниже мы рассмотрим уравнения для волновых функций частиц со спином ноль и со спином  $1/2$ .

### 17.1. Уравнение Клейна — Гордона

Волновое уравнение для частицы со спином ноль называется уравнением Клейна — Гордона. Энергия  $\varepsilon$  и импульс  $\mathbf{p}$  релятивистской частицы в отсутствие внешнего поля удовлетворяют уравнению

$$\frac{1}{c^2}\varepsilon^2 - \mathbf{p}^2 - M^2 c^2 = 0, \quad (140)$$

где  $M$  — масса частицы. Уравнение имеет два решения,  $\varepsilon = \pm\sqrt{c^2\mathbf{p}^2 + M^2 c^4}$ , причём физическим состояниям отвечает знак плюс. Соотношение (140) привело к идее записать релятивистское волновое уравнение для частицы со спином ноль в отсутствие поля в виде

$$\left[ \left( i\hbar \frac{\partial}{c \partial t} \right)^2 - \hat{\mathbf{p}}^2 - M^2 c^2 \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = 0,$$

где  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  — волновая функция. Это уравнение называется уравнением Клейна — Гордона. Волна де Бройля

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (-\varepsilon t + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}) \right]$$

является решением уравнения Клейна — Гордона при выполнении соотношения (140). Уравнение Клейна — Гордона для частицы в электромагнитном поле, описываемом 4-х потенциалом  $A^\mu(\mathbf{r}, t) = (\varphi(\mathbf{r}, t), \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))$ , имеет вид

$$\left[ \left( i\hbar \frac{\partial}{c \partial t} - \frac{e}{c} \varphi(\mathbf{r}, t) \right)^2 - \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 - M^2 c^2 \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (141)$$

Для того чтобы найти интерпретацию волновой функции, нам надо вывести уравнение непрерывности. Для этого запишем уравнение на функцию  $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$ ,

$$\left[ \left( -i\hbar \frac{\partial}{c \partial t} - \frac{e}{c} \varphi(\mathbf{r}, t) \right)^2 - \left( -\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 - M^2 c^2 \right] \Psi^*(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (142)$$

умножим его слева на  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , а уравнение (141) — на  $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$  и вычтем из одного уравнения другое. В результате получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{c \partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \operatorname{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= 0, \\ \rho(\mathbf{r}, t) &= \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left[ \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi(\mathbf{r}, t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \right] + \\ &+ \left[ \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - e\varphi(\mathbf{r}, t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \right]^* \Psi(\mathbf{r}, t), \\ \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= c\Psi^*(\mathbf{r}, t) \left[ \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \right] + \\ &+ c \left[ \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right) \Psi(\mathbf{r}, t) \right]^* \Psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (143)$$

Рассмотрим состояние с определённой энергией,  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp(-i\varepsilon t/\hbar)\psi(\mathbf{r})$  в не зависящем от времени потенциале  $\varphi(\mathbf{r})$ . Тогда плотность  $\rho(\mathbf{r})$  будет равна

$$\rho(\mathbf{r}) = 2[\varepsilon - e\varphi(\mathbf{r})]|\psi(\mathbf{r})|^2.$$

Видно, что эта величина для глубоких потенциалов не является, вообще говоря, положительно определённой. Поэтому она не может интерпретироваться как плотность вероятности найти частицу в точке  $\mathbf{r}$  в интервале  $d^3r$ . Ещё одним отличием уравнения Клейна — Гордона от уравнения Шредингера является следующее. Уравнение Шредингера является дифференциальным уравнением первого порядка по времени, и для нахождения  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  надо задать  $\Psi(\mathbf{r}, 0)$ . Уравнение Клейна — Гордона является дифференциальным уравнением второго порядка по времени, и для нахождения  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  надо задать  $\Psi(\mathbf{r}, 0)$  при  $t = 0$  и  $\partial\Psi(\mathbf{r}, t)/\partial t$  при  $t = 0$ .

**Задача 17.1.** Показать, что для состояний  $\psi_n(\mathbf{r})$  и  $\psi_k(\mathbf{r})$ , отвечающих соответственно энергиям  $\varepsilon_n$  и  $\varepsilon_k$ , в потенциале  $\varphi(\mathbf{r})$ , имеет место соотношение ортогональности

$$\int d^3r [\varepsilon_n + \varepsilon_k - 2e\varphi(\mathbf{r})] \psi_n(\mathbf{r})\psi_k^*(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{при} \quad \varepsilon_n \neq \varepsilon_k.$$

Рассмотрим решение уравнения Клейна — Гордона для частицы в состоянии с определённой энергией в кулоновском поле  $\varphi(r) = -Ze/r$ ,

$$\left[ \frac{1}{c^2} (\varepsilon + Ze^2/r)^2 - \hat{\mathbf{p}}^2 - M^2 c^2 \right] \psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (144)$$

В состоянии с определённым угловым моментом  $\psi(\mathbf{r}) = Y_{lm} R(r)$ , где радиальная функция  $R(r)$  удовлетворяет уравнению, которое удобно записать в виде, похожем на уравнение Шредингера

$$\begin{aligned} \left[ \frac{p_r^2}{2M_0} - \frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 L(L+1)}{2M_0 r^2} \right] R(r) &= E R(r), \\ M_0 = \frac{\varepsilon}{c^2}, \quad L(L+1) &= l(l+1) - (Z\alpha)^2, \quad E = \frac{1}{2\varepsilon}(\varepsilon^2 - M^2 c^4), \end{aligned} \quad (145)$$



где  $\alpha = e^2/(\hbar c) \approx 1/137$  — постоянная тонкой структуры, эффективный орбитальный момент —  $L = -1/2 + \sqrt{(l + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2}$ . Для кулоновского поля

$$E = -\frac{M_0(Ze^2)^2}{2\hbar^2(n_r + L + 1)^2}.$$

Отсюда

$$\varepsilon = \frac{Mc^2}{\sqrt{1 + \frac{(Z\alpha)^2}{N^2}}}, \quad N = n_r + 1/2 + \sqrt{(l + 1/2)^2 - (Z\alpha)^2}, \quad n = n_r + l + 1. \quad (146)$$

Заметим, что локализованные состояния существуют только для положительных энергий, так как при замене  $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$  в уравнении (145) (при этом  $M_0 \rightarrow -M_0$  и  $E \rightarrow -E$ ) мы получим уравнение с кулоновским потенциалом отталкивания. Из уравнения (146) видно, что для уравнения Клейна — Гордона кулоновское вырождение уровней отсутствует. Полученное решение имеет смысл только для  $Z\alpha < 1/2$ , так как при  $Z\alpha > 1/2$  и  $l = 0$  функция  $N$  становится мнимой, что соответствует явлению падения на центр, связанного с сингулярностью кулоновского потенциала. При учёте конечного радиуса ядра особенность при  $Z\alpha = 1/2$  исчезает. При  $Z\alpha \ll 1$  имеем

$$\varepsilon = Mc^2 \left[ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} + \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3} \left( \frac{3}{4n} - \frac{1}{l + 1/2} \right) + \dots \right].$$

Релятивистская поправка  $\propto (Z\alpha)^4$  не согласуется с экспериментом, так как уравнение Клейна — Гордона не учитывает наличие спина у электрона.

Для случая  $|e\varphi(\mathbf{r}, t)| \ll Mc^2$ , мы представим волновую функцию в виде  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp(-iMc^2t/\hbar)\chi(\mathbf{r}, t)$ , пренебрежём членом  $(i\hbar\partial_t - e\varphi(\mathbf{r}, t))^2\chi(\mathbf{r}, t)$  и получим нерелятивистское волновое уравнение Шредингера на функцию  $\chi(\mathbf{r}, t)$ .

## 17.2. Уравнение Дирака

Ниже в этом разделе мы будем рассматривать волновое уравнение для частицы со спином  $1/2$ , называемое уравнением Дирака.

В нерелятивистской квантовой механике частица со спином  $1/2$  описывается уравнением Паули для двухкомпонентной волновой функции. Релятивистское волновое уравнение для частицы со спином  $1/2$  в отсутствие внешнего поля должно иметь решение в виде волны де Бройля  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp[i(-\varepsilon t + \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})/\hbar]U$  с энергией и импульсом, которые удовлетворяют уравнению (140), здесь  $U$  — некоторый постоянный столбец. Оказалось, что минимальный размер столбца, удовлетворяющий указанным требованиям, равен четырём, а уравнение, называемое уравнением Дирака, имеет вид

$$\left[ \gamma^0 \left( i\hbar \frac{\partial}{c \partial t} \right) - \boldsymbol{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{p}} - McI \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (147)$$

где  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  — четырёхкомпонентная волновая функция,  $\gamma^0$  и  $\boldsymbol{\gamma}$  — так называемые матрицы Дирака,  $I$  — единичная матрица. Уравнение Дирака ещё можно записать в виде

$$[\gamma^\mu \hat{p}_\mu - McI] \Psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (148)$$

где  $\gamma^\mu = (\gamma^0, \boldsymbol{\gamma})$ ,  $\hat{p}_\mu = i\hbar\partial/\partial x^\mu$ ,  $x^0 = ct$ , по повторяющимся индексам подразумевается суммирование,

$$A^\mu B_\mu = A^0 B_0 + A^i B_i = A^0 B^0 - \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}.$$

Будем искать решение уравнения Дирака в виде  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp[-ix^\mu p_\mu/\hbar] \psi$ , где  $p^\mu = (\varepsilon/c, \mathbf{p})$  и  $p_\mu = (\varepsilon/c, -\mathbf{p})$ ,  $\psi$  — постоянный столбец. Тогда

$$[\gamma^\mu p_\mu - McI] \psi = 0. \quad (149)$$

Умножим обе части этого уравнения на матрицу  $(\gamma^\mu p_\mu + McI)$ , после чего получаем

$$[(\gamma^\mu p_\mu)^2 - (Mc)^2 I] \psi = 0.$$

Сделаем преобразование

$$\begin{aligned} (\gamma^\mu p_\mu)^2 &= (\gamma^\mu p_\mu)(\gamma^\nu p_\nu) = \left[ \frac{1}{2} (\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu) + \frac{1}{2} (\gamma^\mu \gamma^\nu - \gamma^\nu \gamma^\mu) \right] p_\mu p_\nu = \\ &= \frac{1}{2} (\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu) p_\mu p_\nu. \end{aligned}$$

Отсюда видно, чтобы получить правильное соотношение (140) между энергией и импульсом, необходимо выполнение условия на  $\gamma$ -матрицы

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} I, \quad (150)$$

где  $g^{\mu\nu}$  — метрический тензор ( $g^{00} = 1$ ,  $g^{ij} = -\delta^{ij}$  и  $g^{0i} = 0$ ). Существует много эквивалентных представлений  $\gamma$ -матриц, мы будем использовать так называемое стандартное представление:

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad (151)$$

где  $\boldsymbol{\sigma}$  — матрицы Паули, а нули и единицы — это двухмерная нулевая и единичная матрицы. Матрицы Дирака удовлетворяют соотношениям

$$(\gamma^0)^+ = \gamma^0, \quad (\gamma^i)^+ = -\gamma^i = \gamma^0 \gamma^i \gamma^0, \quad (\gamma^0)^2 = I, \quad (\gamma^i)^2 = -I.$$

Уравнение Дирака для частицы во внешнем электромагнитном поле, которое описывается потенциалом  $A^\mu(\mathbf{r}, t) = (\varphi(\mathbf{r}, t), \mathbf{A}(\mathbf{r}, t))$ , имеет вид

$$\left[ \gamma^\mu \left( \hat{p}_\mu - \frac{e}{c} A_\mu(\mathbf{r}, t) \right) - McI \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (152)$$

Для интерпретации волновой функции, нам надо вывести уравнение непрерывности. Сделаем эрмитово сопряжение уравнения (152), учитывая, что  $(BC)^+ = C^+B^+$  и  $(\gamma^\mu)^+ = \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0$ . Имеем

$$\Psi^+(\mathbf{r}, t)\gamma^0 \left[ \gamma^\mu \left( -\hat{\underline{p}}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu(\mathbf{r}, t) \right) - McI \right] \gamma^0 = 0, \quad (153)$$

где стрелка означает дифференцирование функции, стоящей слева от оператора. Уравнение (153) можно переписать следующим образом

$$\bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) \left[ \gamma^\mu \left( -\hat{\underline{p}}_\mu - \frac{e}{c}A_\mu(\mathbf{r}, t) \right) - McI \right] = 0, \quad (154)$$

где  $\bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \Psi^+(\mathbf{r}, t)\gamma^0$  называется дираковски-сопряжённым спинором. Умножим уравнение (152) слева на  $\bar{\Psi}(\mathbf{r}, t)$ , (154) справа на  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  и вычтем из первого уравнения второе. В результате получим

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} j^\mu(\mathbf{r}, t) = 0, \quad j^\mu(\mathbf{r}, t) = \bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) \gamma^\mu \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (155)$$

Таким образом, мы получили уравнение непрерывности, в котором

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}, t) &= \bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) \gamma^0 \Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi^+(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t), \\ \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) &= \bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\gamma} \Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi^+(\mathbf{r}, t) \boldsymbol{\alpha} \Psi(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (156)$$

где  $\boldsymbol{\alpha} = \gamma^0\boldsymbol{\gamma}$ ,  $\boldsymbol{\alpha}^+ = \boldsymbol{\alpha}$ . Видно, что  $\rho(\mathbf{r}, t)$  является положительно определённой величиной и её можно интерпретировать как плотность вероятности найти частицу в точке  $\mathbf{r}$  в момент времени  $t$ , хотя, как мы увидим, такая интерпретация в сильных полях может быть проблематичной.

### 17.3. Свободное движение дираковской частицы

Вернёмся к уравнению (149), соответствующему свободному движению. Используя явный вид  $\gamma$ -матриц, запишем его в виде

$$\begin{pmatrix} \varepsilon/c - Mc & -\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & -\varepsilon/c - Mc \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} = 0, \quad (157)$$

где  $\phi$  и  $\chi$  — двухкомпонентные спиноры. Решение  $U$  этого уравнения для  $\varepsilon > Mc^2$  и  $V$  для  $\varepsilon < -Mc^2$  имеют вид

$$\begin{aligned} U &= \sqrt{\frac{\varepsilon + Mc^2}{2\varepsilon}} \begin{pmatrix} \phi \\ \frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\varepsilon + Mc^2} \phi \end{pmatrix}, \quad V = \sqrt{\frac{|\varepsilon| + Mc^2}{2|\varepsilon|}} \begin{pmatrix} -\frac{c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{|\varepsilon| + Mc^2} \chi \\ \chi \end{pmatrix}, \\ U^+U &= 1, \quad cU^+\boldsymbol{\alpha}U = \frac{c^2\mathbf{p}}{\varepsilon} = \mathbf{v}, \quad V^+V = 1, \quad cV^+\boldsymbol{\alpha}V = -\frac{c^2\mathbf{p}}{|\varepsilon|} = -\mathbf{v}, \end{aligned} \quad (158)$$

где  $\phi^+\phi = 1$  и  $\chi^+\chi = 1$ . В системе, где  $\mathbf{p} = 0$ , дираковский спинор  $U$  имеет только две верхние ненулевые компоненты, а  $V$  — две нижние ненулевые компоненты. Следовательно, мы имеем два положительно-частотных решения, отвечающие двум ориентациям спина, и два отрицательно-частотных решения. Смысл отрицательно-частотных решений мы обсудим позднее.

## 17.4. Гамильтонова форма уравнения Дирака

Уравнение Дирака можно записать в форме, похожей на уравнение Шредингера. Для этого умножим левую и правую части уравнения (152) на матрицу  $\gamma^0$ . В результате получим

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) = \hat{H}\Psi(\mathbf{r},t), \quad \hat{H} = e\varphi(\mathbf{r},t) + c\boldsymbol{\alpha}\cdot\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\right) + Mc^2\gamma^0. \quad (159)$$

Можно было бы думать, что положительность плотности  $\rho(\mathbf{r},t)$  и гамильтонова форма (159) гарантируют отсутствие трудностей в интерпретации результатов, полученных с помощью уравнения Дирака, но это не так. Заметим, что у гамильтониана  $\hat{H}$  уравнения Дирака нет собственного состояния с наименьшей энергией (т. е. основного состояния) из-за наличия состояний с  $\varepsilon < -Mc^2$ . Наличие трудностей можно продемонстрировать с помощью следующего примера. Рассмотрим гейзенберговский оператор скорости

$$\hat{\mathbf{v}}_H = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\mathbf{r}}_H] = c\boldsymbol{\alpha}.$$

Так как  $(\alpha^i)^2 = I$ , то мы приходим к парадоксальному выводу о том, что собственные значения оператора  $\hat{\mathbf{v}}_H^2$  равны  $3c^2 > c^2$ !

## 17.5. Свойства матриц Дирака

Приведём свойства матриц Дирака, которые мы будем использовать при вычислениях. Введём матрицу  $\gamma^5$ ,

$$\gamma^5 = -i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^5\gamma^\mu + \gamma^\mu\gamma^5 = 0, \quad (160)$$

и матрицы  $\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu]$ ,

$$\sigma^{\mu\nu} = -\sigma^{\nu\mu}, \quad \sigma^{0i} = i\gamma^0\gamma^i = i\alpha^i, \quad \sigma^{ij} = \epsilon^{ijk}\Sigma^k, \quad (161)$$

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = -\gamma^5\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (162)$$

Таким образом, мы имеем шестнадцать матриц:

$$I, \quad \gamma^5, \quad \gamma^\mu, \quad \gamma^5\gamma^\mu, \quad \sigma^{\mu\nu},$$

причём след произведения любых двух разных матриц из этого набора равен нулю. Любую матрицу  $4 \times 4$  можно представить в виде линейной комбинации этих шестнадцати матриц.

## 17.6. Преобразование пространственной инверсии $\hat{P}$

При преобразовании пространственной инверсии  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$  имеем

$$\varphi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) = \varphi(-\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{A}(-\mathbf{r}, t),$$

и функция  $\Psi(-\mathbf{r}, t)$  будет удовлетворять уравнению

$$\left[ \gamma^0 \left( i\hbar \frac{\partial}{c \partial t} - \frac{e}{c} \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) \right) + \boldsymbol{\gamma} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \right) - McI \right] \Psi(-\mathbf{r}, t) = 0. \quad (163)$$

Это уравнение отличается от уравнения Дирака знаком перед матрицей  $\boldsymbol{\gamma}$ . Чтобы получить уравнение Дирака, умножим обе части полученного уравнения слева на  $\gamma^0$  и перенесём эту матрицу направо, используя антикоммутивность с  $\boldsymbol{\gamma}$ , получаем

$$\left[ \gamma^0 \left( i\hbar \frac{\partial}{c \partial t} - \frac{e}{c} \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) \right) - \boldsymbol{\gamma} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \right) - McI \right] \tilde{\Psi}_P(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (164)$$

$$\tilde{\Psi}_P(\mathbf{r}, t) = \hat{P}\Psi(\mathbf{r}, t) = \gamma^0 \Psi(-\mathbf{r}, t).$$

То есть, при  $\hat{P}$  преобразовании  $\phi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \phi(-\mathbf{r}, t)$  и  $\chi(\mathbf{r}, t) \rightarrow -\chi(-\mathbf{r}, t)$ , где  $\phi(\mathbf{r}, t)$  — две верхние, а  $\chi(\mathbf{r}, t)$  — две нижние компоненты дираковского спинора  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ . Говорят, что система, описываемая волновой функцией  $\Psi$ , находится в состоянии с определённой P-чётностью, если  $\hat{P}\Psi = \lambda\Psi$ , где  $\lambda = \pm 1$ . Так как решение уравнения Дирака этому соотношению не удовлетворяет (за счёт матрицы  $\gamma^0$ , см. (164)), то у частицы со спином  $1/2$  не может быть определённой P-чётности. Поэтому нельзя поставить эксперимент, в котором измеряется P-чётность системы со спином  $1/2$  (с любым полуцелым спином). Определённая P-чётность может быть только у системы с целым спином.

## 17.7. Преобразование обращения времени $\hat{T}$

При обращении времени  $t \rightarrow -t$  имеем

$$\varphi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, -t), \quad \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = -\mathbf{A}(\mathbf{r}, -t).$$

Дополнительный знак минус в формуле для вектор-потенциала связан с тем, что  $\tilde{\mathbf{A}}$  пропорционален скорости заряженной частицы, а скорость при замене

$t \rightarrow -t$  меняет знак. Таким образом, функция  $\Psi(\mathbf{r}, -t)$  будет удовлетворять уравнению

$$\left[ \gamma^0 \left( -i\hbar \frac{\partial}{c \partial t} - \frac{e}{c} \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) \right) - \boldsymbol{\gamma} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \right) - McI \right] \Psi(\mathbf{r}, -t) = 0. \quad (165)$$

которое не совпадает с уравнением Дирака. Чтобы получить уравнение Дирака, сделаем сначала комплексное сопряжение уравнения (165) с учётом того, что  $(\gamma^\mu)^* = \gamma^2 \gamma^\mu \gamma^2$  и  $(\gamma^2)^2 = -I$ , получаем

$$\left[ \gamma^0 \left( i\hbar \frac{\partial}{c \partial t} - \frac{e}{c} \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) \right) + \boldsymbol{\gamma} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \right) + McI \right] \gamma^2 \Psi^*(\mathbf{r}, -t) = 0.$$

Умножим обе части полученного уравнения слева на  $\gamma^0 \gamma^5$  и перенесём эту матрицу направо, используя её антикоммутируемость с  $\gamma^0$  и коммутативность с  $\boldsymbol{\gamma}$ . В результате получим уравнение Дирака

$$\left[ \gamma^0 \left( i\hbar \frac{\partial}{c \partial t} - \frac{e}{c} \tilde{\varphi}(\mathbf{r}, t) \right) - \boldsymbol{\gamma} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \tilde{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \right) - McI \right] \tilde{\Psi}_T(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (166)$$

$$\tilde{\Psi}_T(\mathbf{r}, t) = \hat{T} \Psi(\mathbf{r}, t) = \gamma^0 \gamma^5 \gamma^2 \Psi^*(\mathbf{r}, -t) = -i \gamma^1 \gamma^3 \Psi^*(\mathbf{r}, -t).$$

## 17.8. Преобразование зарядового сопряжения $\hat{C}$

Сделаем комплексное сопряжение уравнения (152) и учтём, что  $(\gamma^\mu)^* = \gamma^2 \gamma^\mu \gamma^2$  и  $(\gamma^2)^2 = -I$ . В результате получаем

$$\left[ \gamma^0 \left( i\hbar \frac{\partial}{c \partial t} + \frac{e}{c} \varphi(\mathbf{r}, t) \right) - \boldsymbol{\gamma} \cdot \left( \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right) - McI \right] \tilde{\Psi}_C(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (167)$$

$$\tilde{\Psi}_C(\mathbf{r}, t) = \hat{C} \Psi(\mathbf{r}, t) = i \gamma^2 \Psi^*(\mathbf{r}, t).$$

Мы видим, что функция  $\tilde{\Psi}_C(\mathbf{r}, t)$  удовлетворяет уравнению Дирака с зарядом  $-e$ . Если мы возьмём в качестве  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  отрицательно-частотное решение, то  $\tilde{\Psi}_C(\mathbf{r}, t)$  будет положительно-частотным решением, но с зарядом другого знака, т. е. будет волновой функцией античастицы. Применим операцию зарядового сопряжения к отрицательно-частотному решению  $V$  свободного уравнения Дирака, см. (158) :

$$\hat{C} V = \sqrt{\frac{|\varepsilon| + Mc^2}{2|\varepsilon|}} \begin{pmatrix} i\sigma_2 \chi^* \\ \frac{ic \sigma_2 \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{p}}{|\varepsilon| + Mc^2} \chi^* \end{pmatrix} = \sqrt{\frac{|\varepsilon| + Mc^2}{2|\varepsilon|}} \begin{pmatrix} \frac{c \sigma_2 \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{p} \sigma_2}{|\varepsilon| + Mc^2} \phi_a \\ \phi_a \end{pmatrix},$$

где  $\phi_a = i\sigma_2 \chi^*$ . Легко проверить, что  $\sigma_2 \boldsymbol{\sigma}^* \sigma_2 = -\boldsymbol{\sigma}$  и  $\sigma_2 \boldsymbol{\sigma} \sigma_2 = -\boldsymbol{\sigma}^*$ . Поэтому  $\hat{C} V$  совпадает с положительно-частотным решением  $U$ , см. уравнение (158), с импульсом  $-\mathbf{p}$ . Найдём направление спина  $\boldsymbol{\zeta}_a$ , соответствующее спинору  $\phi_a$ :

$$\boldsymbol{\zeta}_a = \phi_a^+ \boldsymbol{\sigma} \phi_a = \chi^T \sigma^2 \boldsymbol{\sigma} \sigma^2 \chi^* = -\chi^T \boldsymbol{\sigma}^* \chi^* = -(\chi^+ \boldsymbol{\sigma} \chi)^* = -\boldsymbol{\zeta}.$$

Таким образом, энергия, импульс, заряд и направление спина античастиц имеют противоположный знак соответствующих величин отрицательно-частотных решений. Поэтому можно рассматривать античастицы как «дырки» в «море» частиц с отрицательной энергией (море Дирака).

Рассмотрим позитроний — водородоподобный атом, являющийся связанным состоянием электрона и позитрона (античастицы электрона). Так как волновая функция этой системы является билинейной функцией спиноров  $\phi$  и  $\phi_a$ , т. е.  $\phi$  и  $\chi^*$ , то эта функция при  $P$ -преобразовании меняет знак. Таким образом, внутренняя пространственная чётность системы, состоящей из частицы и античастицы со спином  $1/2$  равна  $-1$  и не зависит от полного спина системы (ноль или единица). Если орбитальный момент позитрония равен  $l$ , то полная пространственная чётность системы равна  $P = (-1)^{l+1}$ .

## 17.9. Преобразование Лоренца и уравнение Дирака

Напомним некоторые сведения о преобразованиях Лоренца. Четырёх-векторы с верхними и нижними индексами связаны соотношениями  $x^\mu = g^{\mu\nu} x_\nu$  и  $x_\mu = g_{\mu\nu} x^\nu$ , где  $g_{\mu\nu}$ ,  $g^{\mu\nu}$  — метрические тензоры:  $g_{00} = g^{00} = 1$ ,  $g_{ij} = g^{ij} = -\delta^{ij}$  и  $g_{0i} = g^{0i} = 0$ . Заметим, что в общем случае выполняется соотношение  $g_{\mu\alpha} g^{\alpha\mu'} = \delta_\mu^{\mu'}$ , где  $\delta_\mu^{\mu'}$  — символ Кронекера, равный нулю для  $\mu \neq \mu'$  и равный единице для  $\mu = \mu'$ .

При переходе из одной системы отсчёта в другую 4-х вектора  $x^\mu$  и  $x_\mu$  преобразуются следующим образом:

$$\tilde{x}^\nu = L^{\nu\alpha} g_{\alpha\mu} x^\mu, \quad \tilde{x}_\nu = L_{\nu\alpha} g^{\alpha\mu} x_\mu, \quad (168)$$

где матрицы преобразования  $L^{\mu\nu}$  и  $L_{\mu\nu}$  соответствуют поворотам системы координат, переходу в движущуюся систему отсчёта (буст), а также пространственной инверсии ( $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ ) и обращению времени ( $t \rightarrow -t$ ). Эти матрицы удовлетворяют соотношению

$$L^{\nu\alpha} g_{\alpha\mu} L_{\nu\beta} g^{\beta\mu'} = \delta_\mu^{\mu'}. \quad (169)$$

Из соотношения (169) следует выражение для обратной матрицы

$$(L^{-1})^\nu{}_\mu = L_{\mu\alpha} g^{\alpha\nu}$$

и соответствующего обратного преобразования Лоренца:

$$x^\nu = \tilde{x}^\mu L_{\mu\alpha} g^{\alpha\nu}, \quad x_\nu = \tilde{x}_\mu L^{\mu\alpha} g_{\alpha\nu}.$$

Производные по координатам  $x^\mu$  и  $\tilde{x}^\mu$  связаны соотношениями:

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} = L^{\nu\alpha} g_{\alpha\mu} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}^\nu} \equiv L^{\nu\alpha} g_{\alpha\mu} \tilde{\partial}_\nu, \quad \tilde{\partial}_\nu = L_{\nu\alpha} g^{\alpha\mu} \partial_\mu.$$

Потенциал электромагнитного поля  $A_\mu(x)$ , который явно зависит от координаты  $x$ , при переходе из одной системы отсчёта в другую преобразуется следующим образом:

$$A_\mu(x) = \tilde{A}_\nu(\tilde{x}) L^{\nu\alpha} g_{\alpha\mu}. \quad (170)$$

Для того чтобы после преобразования Лоренца уравнение Дирака сохранило свой вид, необходимо также сделать преобразование волновой функции  $\Psi(x) = S \tilde{\Psi}(\tilde{x})$ , где  $S$  — постоянная матрица, действующая на дираковский спинор. Имеем

$$\left[ (S^{-1} \gamma^\mu S) L^{\nu\alpha} g_{\alpha\mu} \left( \hat{p}_\nu - \frac{e}{c} \tilde{A}_\nu(\tilde{x}) \right) - M c I \right] \tilde{\Psi}(\tilde{x}) = 0, \quad (171)$$

где  $\hat{p}_\nu = i\hbar \partial / \partial \tilde{x}^\nu$ . Мы видим, что инвариантность уравнения относительно преобразования Лоренца требует выполнения условия

$$(S^{-1} \gamma^\mu S) L^{\nu\alpha} g_{\alpha\mu} = \gamma^\nu \Rightarrow S^{-1} \gamma^\mu S = \gamma^\nu L_{\nu\alpha} g^{\alpha\mu}, \quad \gamma^\mu S L^{\nu\alpha} g_{\alpha\mu} = S \gamma^\nu. \quad (172)$$

Сделаем эрмитово сопряжение обеих сторон последнего равенства, учитывая соотношения  $(BC)^+ = C^+ B^+$  и  $(\gamma^\mu)^+ = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0$ . После этого умножим обе части получившегося равенства слева на  $\gamma^0$  и справа на  $\gamma^0 S$ , получим

$$(\gamma^0 S^+ \gamma^0 S) \gamma^\nu = \gamma^\nu (\gamma^0 S^+ \gamma^0 S).$$

То есть, мы видим, что для любого  $S$  матрица  $\gamma^0 S^+ \gamma^0 S$  коммутирует с любой  $\gamma$ -матрицей, поэтому она пропорциональна единичной матрице. С учётом сохранения нормировки волновой функции  $\Psi$ , коэффициент пропорциональности удобно выбрать равным единице. В этом случае

$$\gamma^0 S^+ \gamma^0 S = 1, \quad \Rightarrow \quad S^{-1} = \gamma^0 S^+ \gamma^0,$$

т. е.  $S$  не является унитарной матрицей.

Рассмотрим трансформационные свойства некоторых билинейных форм. Для  $\bar{\Psi} \Psi$  имеем

$$\bar{\Psi} \Psi = \Psi^+ \gamma^0 \Psi = \tilde{\Psi}^+ S^+ \gamma^0 S \tilde{\Psi} = \tilde{\Psi} \gamma^0 S^+ \gamma^0 S \tilde{\Psi} = \tilde{\Psi} \tilde{\Psi},$$

т. е. эта величина является лоренцевым скаляром.

Для  $\bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi$  мы получаем следующие трансформационные свойства:

$$\begin{aligned} \bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi &= \Psi^+ \gamma^0 \gamma^\mu \Psi = \tilde{\Psi}^+ S^+ \gamma^0 \gamma^\mu S \tilde{\Psi} = \tilde{\Psi} \gamma^0 S^+ \gamma^0 \gamma^\mu S \tilde{\Psi} = \\ &= \tilde{\Psi} \gamma^0 S^+ \gamma^0 S S^{-1} \gamma^\mu S \tilde{\Psi} = \tilde{\Psi} S^{-1} \gamma^\mu S \tilde{\Psi} = \tilde{\Psi} \gamma^\nu \tilde{\Psi} L_{\nu\alpha} g^{\alpha\mu}, \end{aligned} \quad (173)$$



таким образом  $\bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi$  является 4-х вектором. Аналогично,  $\bar{\Psi}\sigma^{\mu\nu}\Psi$  является 4-х тензором второго ранга. Рассмотрим теперь матричный элемент  $\bar{\Psi}\gamma^5\Psi$ . Представим матрицу  $\gamma^5$  в виде

$$\gamma^5 = \frac{i}{4!} \epsilon_{\mu\nu\alpha\beta} \gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\alpha \gamma^\beta,$$

где  $\epsilon_{\mu\nu\alpha\beta}$  — антисимметричный тензор,  $\epsilon_{0123} = -1$ . Тогда

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}\gamma^5\Psi &= \frac{i \epsilon_{\mu\nu\alpha\beta}}{4!} \bar{\Psi} \gamma^{\mu'} \gamma^{\nu'} \gamma^{\alpha'} \gamma^{\beta'} \tilde{\Psi} L_{\mu'\mu''} g^{\mu''\mu} L_{\nu'\nu''} g^{\nu''\nu} L_{\alpha'\alpha''} g^{\alpha''\alpha} L_{\beta'\beta''} g^{\beta''\beta} = \\ &= \frac{i \epsilon^{\mu''\nu''\alpha''\beta''}}{4!} \bar{\Psi} \gamma^{\mu'} \gamma^{\nu'} \gamma^{\alpha'} \gamma^{\beta'} \tilde{\Psi} L_{\mu'\mu''} L_{\nu'\nu''} L_{\alpha'\alpha''} L_{\beta'\beta''} = \\ &= \det L \frac{i \epsilon_{\mu'\nu'\alpha'\beta'}}{4!} \bar{\Psi} \gamma^{\mu'} \gamma^{\nu'} \gamma^{\alpha'} \gamma^{\beta'} \tilde{\Psi} = \det L \tilde{\Psi} \gamma^5 \tilde{\Psi}, \end{aligned} \quad (174)$$

где  $\det L$  — определитель матрицы  $L^\mu_{\nu'}$ . При бустах и поворотах  $\det L = 1$ , а при пространственном отражении  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$  имеем  $\det L = -1$ . Таким образом, с точки зрения пространственной инверсии  $\bar{\Psi}\gamma^5\Psi$  является псевдоскаляром, а с точки зрения поворотов и бустов — скаляром. Аналогично,

$$\bar{\Psi}\gamma^5\gamma^\mu\Psi = \det L \tilde{\Psi} \gamma^5\gamma^\nu \tilde{\Psi} L_{\nu\alpha} g^{\alpha\mu}, \quad (175)$$

т. е., с точки зрения пространственной инверсии  $\bar{\Psi}\gamma^5\gamma^\mu\Psi$  является псевдовектором, а с точки зрения поворотов и бустов — вектором.

Рассмотрим инфинитезимальное преобразование Лоренца  $L^{\mu\nu} = g^{\mu\nu} + t^{\mu\nu}$  с малыми  $t^{\mu\nu}$ . Тогда из соотношения  $L^{\nu\alpha} g_{\alpha\mu} L_{\nu\beta} g^{\beta\mu'} = \delta_\mu^{\mu'}$  следует, что  $t^{\mu\nu} + t^{\nu\mu} = 0$ . Представим  $S$  в виде  $S = 1 + \delta S$ . Далее, из соотношения  $\gamma^\mu S L^{\nu\alpha} g_{\alpha\mu} = S \gamma^\nu$  следует, что

$$[\delta S, \gamma^\nu] = t^\nu_{\mu} \gamma^\mu.$$

Далее воспользуемся равенством

$$[\sigma^{\alpha\beta}, \gamma^\nu] = 2i (g^{\nu\beta} \gamma^\alpha - g^{\nu\alpha} \gamma^\beta),$$

которое легко доказывается, используя (150). В результате находим

$$S = 1 + \frac{i}{4} t_{\mu\nu} \sigma^{\mu\nu}.$$

## 17.10. Уравнение Паули

Перейдём к нерелятивистскому приближению уравнению Дирака (152). Для этого представим решение уравнения Дирака в виде произведения  $\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp(-iMc^2 t/\hbar) \psi(\mathbf{r}, t)$  и будем считать, что все компоненты  $eA_\mu(\mathbf{r}, t)$

много меньше  $Mc^2$ . Тогда в первом порядке по  $1/c$  нижние компоненты  $\chi$  дираковского спинора  $\psi$  выражаются через верхние компоненты  $\phi$  следующим образом

$$\chi = \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathcal{P}})}{2Mc} \phi, \quad \hat{\mathcal{P}} = \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t),$$

так что верхние компоненты удовлетворяют уравнению

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = \left[ e\varphi(\mathbf{r}, t) + \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathcal{P}})^2}{2M} \right] \phi.$$

С учётом того, что  $\sigma^i \sigma^j = \delta^{ij} + i\epsilon^{ijk} \sigma^k$ , имеем

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathcal{P}})^2 &= \hat{\mathcal{P}}^2 + \frac{i}{2} \epsilon^{ijk} [\hat{\mathcal{P}}^i, \hat{\mathcal{P}}^j] \sigma^k, \\ [\hat{\mathcal{P}}^i, \hat{\mathcal{P}}^j] &= \frac{ie\hbar}{c} \left( \frac{\partial}{\partial x^i} A^j - \frac{\partial}{\partial x^j} A^i \right) = \frac{ie\hbar}{c} \epsilon^{ija} \mathcal{H}^a, \end{aligned} \quad (176)$$

где  $\mathcal{H}$  — магнитное поле. В результате мы получаем уравнение Паули с магнитным моментом  $\mu = e\hbar/(2Mc)$ :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = \left[ e\varphi(\mathbf{r}, t) + \frac{\hat{\mathcal{P}}^2}{2M} - \frac{e\hbar}{2Mc} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{H}) \right] \phi.$$

Таким образом, из уравнения Дирака следует предсказание для величины магнитного момента электрона,  $\mu_e = -\mu_B$ , и эта величина очень близка к экспериментально-наблюдаемой,  $\mu_e = -1,001 \mu_B$ . Но у протонов (не говоря уже о нейтронах) магнитный момент очень сильно отличается от  $\mu_N = |e|\hbar/(2M_p c)$ ,  $\mu_p = 2,79 \mu_N$  и  $\mu_n = -1,91 \mu_N$ . Решение этой проблемы обсуждается ниже.

## 17.11. Обобщённое уравнение Дирака

Для того чтобы решить проблему с магнитными моментами протона и нейтрона, было написано обобщённое уравнение Дирака

$$\left[ \gamma^\mu \hat{\mathcal{P}}_\mu - McI - \frac{\mu'}{2c} \sigma_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (177)$$

где  $\mu' = \mu - e\hbar/(2Mc)$  — аномальный спиновый магнитный момент, а  $\mu$  — полный спиновый магнитный момент частицы. Так как

$$F_{0i} = \mathcal{E}^i, \quad F_{ij} = -\epsilon^{ijk} \mathcal{H}^k, \quad \sigma^{0i} = i\alpha^i, \quad \sigma^{ij} = \epsilon^{ijk} \Sigma^k,$$

где антисимметричный трёхмерный тензор  $\epsilon^{ijk}$  равен единице для компоненты  $\epsilon^{123}$ , то

$$\left[ \gamma^\mu \hat{\mathcal{P}}_\mu - McI + \frac{\mu'}{c} (\boldsymbol{\Sigma} \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}} - i\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (178)$$

В нерелятивистском приближении получим

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = \left[ e\varphi(\mathbf{r}, t) + \frac{\hat{\mathcal{P}}^2}{2M} - \left( \frac{e\hbar}{2Mc} + \mu' \right) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}}) \right] \phi.$$

Строго говоря, уравнение (178) в случае очень сильных полей не является применимым. Чтобы показать это, рассмотрим основное состояние  $\Psi_0$  нейтрона в однородном постоянном магнитном поле  $\boldsymbol{\mathcal{H}}$ , направленном вдоль оси  $z$ . Так как заряд нейтрона равен нулю, то импульс  $\mathbf{p}$  сохраняется, и основному состоянию соответствует  $|\mathbf{p}| = 0$ . Поэтому для основного состояния

$$\left[ \gamma^0 \frac{\varepsilon}{c} - McI + \frac{\mu'}{c} \boldsymbol{\mathcal{H}} \Sigma^3 \right] \Psi_0(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (179)$$

или

$$\sigma^3 \phi = \lambda \phi, \quad \chi = 0, \quad \varepsilon = Mc^2 - \lambda \mu' \mathcal{H}, \quad |\lambda| = 1.$$

Так как для нейтрона  $\mu' < 0$ , то для основного состояния  $\lambda = -1$ . Видно, что при  $\mathcal{H} \rightarrow \infty$  энергия  $\varepsilon \rightarrow -\infty$ , хотя проблемы возникают при гигантских полях  $\mathcal{H} \gtrsim Mc^2/\mu'$ .

## 17.12. Сохранение полного момента в центрально-симметричном поле

Как следует из уравнения Гейзенберга, чтобы узнать, сохраняется ли некоторая физическая величина или нет, достаточно вычислить коммутатор соответствующего оператора с Гамильтонианом. Рассмотрим гамильтониан частицы в потенциале  $A^\mu = (\Phi(r), \mathbf{0})$ , где  $\Phi(r)$  является сферически-симметричной функцией,

$$\hat{H} = e\Phi(r) + c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{p}} + Mc^2 \gamma^0. \quad (180)$$

Учитывая, что

$$[\hat{p}^i, \hat{l}^j] = i\epsilon^{ijk} \hat{p}^k, \quad [\alpha^i, \Sigma^j] = 2i\epsilon^{ijk} \alpha^k, \quad [\gamma^0, \Sigma^j] = 0,$$

получаем

$$[\hat{H}, \hat{l}^j] = i\epsilon^{ijk} \alpha^i \hat{p}^k, \quad [\hat{H}, \frac{1}{2}\Sigma^j] = i\epsilon^{ijk} \alpha^k \hat{p}^i, \quad [\hat{H}, \hat{J}^j] = 0, \quad \hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{l}} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma}.$$

Мы видим, что оператор  $\Sigma/2$  можно интерпретировать как оператор спина, орбитальный момент  $\mathbf{l}$  не сохраняется даже в отсутствии поля, так же как и спин, а полный момент  $\mathbf{J}$  сохраняется.

Состояние нерелятивистской частицы со спином  $1/2$ , полным моментом  $j$ , проекцией  $j_z = m$  и орбитальным моментом  $l = j + \lambda/2$ , где  $\lambda = \pm 1$ , описывается двухкомпонентным сферическим спинором  $\Omega_{jlm}(\theta, \varphi)$ . Чётность этого спинора равна  $(-1)^l$ . Для релятивистской частицы при преобразовании пространственной инверсии  $\phi(\mathbf{r}) \rightarrow \phi(-\mathbf{r})$  и  $\chi(\mathbf{r}) \rightarrow -\chi(-\mathbf{r})$ . Поэтому, чтобы состояние имело чётность  $(-1)^l$ , должно выполняться соотношение  $\chi(-\mathbf{r}) = (-1)^{l+1}\chi(\mathbf{r})$ , т. е.  $\chi(\mathbf{r}) \propto \Omega_{jl'm}(\theta, \varphi)$ , где  $l' = j - \lambda/2$ . Следовательно, дираковский спинор в состоянии с полным моментом  $j$ , проекцией  $j_z = m$  и чётностью  $(-1)^l$  можно записать в виде

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \Omega_{jlm}(\theta, \varphi) f(r) \\ -\lambda \Omega_{jl'm}(\theta, \varphi) g(r) \end{pmatrix}. \quad (181)$$

Для того чтобы записать уравнения на функции  $f(r)$  и  $g(r)$ , воспользуемся соотношениями

$$\begin{aligned} \Omega_{jl'm}(\theta, \varphi) &= i\lambda (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}) \Omega_{jlm}(\theta, \varphi), \\ (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) &= \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{i\hbar}{r} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{l}} = -i\hbar \left[ \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{l}} \right]. \end{aligned} \quad (182)$$

Первое из этих соотношений можно пояснить следующим образом. Оператор  $(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})$  коммутирует с оператором  $\hat{\mathbf{J}}$ , т. е. действие этого оператора не может приводить к изменению  $j$ , но меняет чётность состояния. Кроме того,  $(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})^2 = 1$ . Следовательно,  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n})\Omega_{jlm} = a\Omega_{jl'm}$  и  $|a| = 1$ . Вторая формула в (182) является следствием соотношений  $\sigma^i \sigma^j = \delta^{ij} + i\epsilon^{ijk} \sigma^k$ ,  $\mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \partial/\partial r$  и  $\mathbf{n} \times \hat{\mathbf{p}} = \hbar \hat{\mathbf{l}}/r$ .

Подставим волновую функцию (181) в уравнение Дирака для частицы в потенциале  $u(r) = e\Phi(r)$  и умножим уравнение слева на  $\Sigma \cdot \mathbf{n}$ . В результате, используя приведённые соотношения, получим

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} f(r) + \frac{1 + \varkappa}{r} f(r) - \frac{1}{\hbar c} [\varepsilon - u(r) + Mc^2] g(r) &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial r} g(r) + \frac{1 - \varkappa}{r} g(r) + \frac{1}{\hbar c} [\varepsilon - u(r) - Mc^2] f(r) &= 0, \end{aligned} \quad (183)$$

где  $\varkappa = \lambda(j + 1/2)$ . В кулоновском потенциале  $u(r) = -Ze^2/r$  на расстояниях  $r \ll \hbar/(Mc)$  имеем

$$f(r) = \frac{Z\alpha}{\nu + \varkappa} g(r) \propto r^{\nu-1}, \quad \nu = \sqrt{\varkappa^2 - (Z\alpha)^2}.$$

Таким образом, в кулоновском поле решения уравнения Дирака для основного состояния являются сингулярными на малых расстояниях ( $f \propto r^{\nu_0-1}$ ,

где  $\nu_0 = \sqrt{1 - (Z\alpha)^2}$ , в отличие от нерелятивистского случая. Однако эта сингулярность не нарушает нормируемость волновой функции для  $Z\alpha < 1$ . То, что решения имеют смысл только для  $Z\alpha < 1$ , связано с явлением падения на центр в сингулярном кулоновском потенциале. При учёте конечного размера ядра проблемы возникают при  $Z \sim 170$ , что связано с рождением электрон-позитронных пар в сильных полях. На больших расстояниях

$$f(r) = -\sqrt{\frac{Mc^2 + \varepsilon}{Mc^2 - \varepsilon}} g \propto \frac{1}{r} \exp(-Kr), \quad K = \frac{\sqrt{M^2c^4 - \varepsilon^2}}{\hbar c}.$$

Решение системы (183) для кулоновского потенциала даёт спектр

$$\varepsilon = mc^2 \left[ 1 + \frac{(Z\alpha)^2}{(\nu + n_r)^2} \right]^{-1/2}, \quad (184)$$

где  $n_r$  — радиальное квантовое число,  $n_r = 0, 1, 2, \dots$  при  $\lambda < 0$  и, соответственно,  $n_r = 1, 2, \dots$  при  $\lambda > 0$ . Мы видим, что для фиксированного  $n_r$  энергии уровней с  $l = j + 1/2$  и  $l = j - 1/2$  совпадают. При  $Z\alpha \ll 1$  имеем

$$\varepsilon \approx mc^2 \left[ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} + \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3} \left( \frac{3}{4n} - \frac{1}{j + 1/2} \right) \right], \quad n = j + 1/2 + n_r. \quad (185)$$

### 17.13. Тонкая структура атома водорода

Выведем формулу (185), используя понятие об эффективном гамильтониане  $\hat{H}_{eff}$ . Определим его таким образом, чтобы с точностью до членов  $v^2/c^2$

$$\begin{aligned} M &\equiv \int d^3r U_{\mathbf{p}_2}^+ e^{-i\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}/\hbar} \left[ -\frac{Ze^2}{r} \right] e^{i\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r}/\hbar} U_{\mathbf{p}_1} = \\ &= \int d^3r \phi_2^+ e^{-i\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}/\hbar} \hat{H}_{eff} e^{i\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r}/\hbar} \phi_1, \end{aligned}$$

где  $U_{\mathbf{p}_2}$  и  $U_{\mathbf{p}_1}$  — дираковские спиноры, соответствующие импульсам  $\mathbf{p}_2$  и  $\mathbf{p}_1$  и нерелятивистским спинорам  $\phi_2$  и  $\phi_1$ . Подставим явный вид спиноров, возьмём интеграл по  $d^3r$  и удержим члены порядка  $v^2/c^2$ . В результате получим

$$M = \phi_2^+ \left[ -\frac{4\pi Ze^2}{q^2} + \frac{\pi Ze^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} - \frac{i\pi Ze^2 \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{q} \times \mathbf{p}_1]}{m^2 c^2 q^2} \right] \phi_1, \quad \mathbf{q} = \frac{\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1}{\hbar}. \quad (186)$$

Взяв обратное преобразование Фурье, находим

$$\hat{H}_{eff} = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\pi Ze^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} \delta(\mathbf{r}) + \frac{Ze^2 \hbar^2 (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{l}})}{4m^2 c^2 r^3}. \quad (187)$$

Кинетическая энергия релятивистской частицы с точностью до членов  $v^2/c^2$  равна  $T = p^2/(2m) - (p^2)^2/(8m^3c^2)$ . Поэтому релятивистская поправка  $\delta\hat{H}$  к нерелятивистскому гамильтониану частицы в кулоновском поле равна:

$$\delta\hat{H} = -\frac{(\hat{\mathbf{p}}^2)^2}{8m^3c^2} + \frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2m^2c^2}\delta(\mathbf{r}) + \frac{Ze^2\hbar^2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{l}})}{4m^2c^2r^3}. \quad (188)$$

Таким образом  $\delta\hat{H}$  является суммой трёх вкладов,  $\delta\hat{H} = \delta\hat{H}_1 + \delta\hat{H}_2 + \delta\hat{H}_3$ .

## 17.14. Интерпретация различных вкладов в тонкую структуру

Первый вклад  $\delta\hat{H}_1$  имеет простую интерпретацию: как уже говорилось, он возникает из разложения дисперсионного соотношения релятивистской частицы:

$$\sqrt{m^2c^4 + \mathbf{p}^2c^2} \approx mc^2 + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{(\mathbf{p}^2)^2}{8m^3c^2} + \dots \quad (189)$$

Для частицы со спином ноль только  $\delta\hat{H}_1$  даёт вклад в релятивистскую поправку. Поэтому второй и третий члены в (188) имеют спиновое происхождение, хотя  $\delta\hat{H}_2$  и не содержит оператор спина. Этот вклад не имеет простой интерпретации, а вот третий вклад  $\delta\hat{H}_3$  имеет наглядную интерпретацию. Он является суммой двух вкладов,  $\delta\hat{H}_3 = h_1 + h_2$ . Слагаемое  $h_1$  является взаимодействием магнитного момента электрона  $\boldsymbol{\mu} = \mu\boldsymbol{\sigma}$  с магнитным полем  $\boldsymbol{\mathcal{H}} = [\boldsymbol{\mathcal{E}} \times \boldsymbol{\beta}]$ , которое возникает в системе покоя электрона в результате преобразования Лоренца из электрического поля  $\boldsymbol{\mathcal{E}} = Q\mathbf{r}/r^3$ , где  $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{v}/c$ ,  $\mathbf{v}$  — скорость частицы,  $Q = -Ze$  — заряд ядра. Имеем

$$h_1 = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}} = -\mu[\boldsymbol{\mathcal{E}} \times \boldsymbol{\beta}] \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (190)$$

Слагаемое  $h_2$  связано с так называемой прецессией Томаса. Представим себе, что нет вообще электромагнитного поля, а частица движется ускоренно под действием каких-то других (не электромагнитных) сил. Покажем, что и в этом случае спин будет зависеть от времени. Четырёх-вектор скорости  $U^\mu$  и 4-х вектор спина  $S^\mu$  в системе покоя частицы имеют вид:

$$U^\mu = (1, \mathbf{0}), \quad S^\mu = (0, \mathbf{s}), \quad (191)$$

где  $\mathbf{s}$  — нерелятивистский вектор спина. В системе, где частица имеет скорость  $\mathbf{v}$  получаем, используя преобразования Лоренца:

$$U^\mu = (\gamma, \gamma\boldsymbol{\beta}), \quad S^\mu = \left( \gamma\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\beta}, \quad \mathbf{s} + \frac{(\gamma - 1)(\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\beta})\boldsymbol{\beta}}{\beta^2} \right), \quad (192)$$

где  $\boldsymbol{\beta} = \mathbf{v}/c$  и  $\gamma = 1/\sqrt{1 - \beta^2}$ . Таким образом

$$U_\mu U^\mu = 1, \quad S_\mu U^\mu = 0. \quad (193)$$

Предположим теперь, что  $dS^\mu/dt = 0$ . Умножим это равенство на  $U_\mu$ . Тогда получим

$$U_\mu dS^\mu/dt = d(U_\mu S^\mu)/dt - S_\mu dU^\mu/dt = -S_\mu dU^\mu/dt = 0,$$

что не выполняется для произвольного ускорения  $dU^\mu/dt$ . Поэтому уравнение, описывающее динамику спина за счёт ускорения (прецессия Томаса), можно написать в виде

$$\frac{dS^\mu}{dt} = -U^\mu \left( S_\nu \frac{dU^\nu}{dt} \right). \quad (194)$$

Разлагая  $\mathbf{S}$  до квадратичных по  $\beta$  членов, получаем:

$$\mathbf{S} = \mathbf{s} + \frac{1}{2}(\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\beta}) \boldsymbol{\beta} + \dots$$

Подставляя это разложение в (194) и удерживая квадратичные по  $\beta$  члены, находим уравнение на  $\mathbf{s}$ :

$$\dot{\mathbf{s}} + \frac{1}{2} \left[ \dot{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\beta}) + \boldsymbol{\beta}(\mathbf{s} \cdot \dot{\boldsymbol{\beta}}) \right] = \boldsymbol{\beta}(\mathbf{s} \cdot \dot{\boldsymbol{\beta}}),$$

где  $\dot{A} = dA/dt$ . Окончательно получаем

$$\dot{\mathbf{s}} = \frac{1}{2}[\mathbf{s} \times [\boldsymbol{\beta} \times \dot{\boldsymbol{\beta}}]]. \quad (195)$$

Теперь вспомним уравнение Гейзенберга и коммутационные соотношения для компонент оператора спина

$$\dot{\mathbf{s}} = \frac{i}{\hbar}[h_2, \mathbf{s}], \quad [s^i, s^j] = i \varepsilon^{ijk} s^k. \quad (196)$$

Используя эти соотношения и (195) находим  $h_2$ :

$$h_2 = -\frac{\hbar}{2}[\boldsymbol{\beta} \times \dot{\boldsymbol{\beta}}] \cdot \mathbf{s}. \quad (197)$$

Используя второй закон Ньютона:  $m\dot{\mathbf{v}} = e\boldsymbol{\mathcal{E}}$ , или  $\dot{\boldsymbol{\beta}} = e/(mc)\boldsymbol{\mathcal{E}}$ , получаем

$$h_2 = \frac{e\hbar}{4mc}[\boldsymbol{\mathcal{E}} \times \boldsymbol{\beta}] \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (198)$$

Окончательно, для  $\delta\hat{H}_3 = h_1 + h_2$  получаем

$$\delta\hat{H}_3 = -\left( \mu - \frac{e\hbar}{4mc} \right) [\boldsymbol{\mathcal{E}} \times \boldsymbol{\beta}] \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (199)$$

Так как  $\boldsymbol{\mathcal{E}} = Q\mathbf{r}/r^3$ ,  $\boldsymbol{\beta} = \hat{\mathbf{p}}/(mc)$  и  $[\mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}] = \hbar\hat{\mathbf{l}}$ , то

$$\delta\hat{H}_3 = -\frac{\hbar Q}{mc} \left( \mu - \frac{e\hbar}{4mc} \right) \left( \frac{\hat{\mathbf{l}} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{r^3} \right). \quad (200)$$

Очевидно, эта формула справедлива для любой частицы со спином  $1/2$  при соответствующей подстановке магнитного момента и электрического заряда частицы. Для электрона  $\mu = e\hbar/(2mc)$  и, следовательно,  $\mu - e\hbar/(4mc) = \mu/2$  (томасовская половинка). Однако для нейтрона электрический заряд равен нулю,  $e_n = 0$ , и  $\mu_n = -1,91|e|\hbar/(2m_p c) \neq 0$ , т. е. никакой половинки нет. А для протона  $\mu_p = 2,79|e|\hbar/(2m_p c)$  и  $e_p = |e|$  — тоже нет половинки ( $m_p$  — масса протона). Таким образом, *спин-орбитальное взаимодействие — это сумма двух независимых эффектов!*

Аналогично, можно показать, что в общем виде поправка  $\delta\hat{H}_2$  равна

$$\delta\hat{H}_2 = -\frac{2\pi\hbar Q}{mc} \left( \mu - \frac{e\hbar}{4mc} \right) \delta(\mathbf{r}). \quad (201)$$

Сумма  $\delta\hat{H}_2 + \delta\hat{H}_3$  равна

$$\delta\hat{H}_2 + \delta\hat{H}_3 = -\frac{\hbar Q}{mc} \left( \mu - \frac{e\hbar}{4mc} \right) \left[ 2\pi\delta(\mathbf{r}) + \frac{\hat{\mathbf{l}} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{r^3} \right]. \quad (202)$$

Поправки  $\delta\hat{H}_2$  и  $\delta\hat{H}_3$  никогда не работают одновременно. Поправка  $\delta\hat{H}_2$  даёт ненулевой вклад только для нулевого орбитального момента  $l = 0$ , для которого  $\psi(0) \neq 0$ . При этом вклад  $\delta\hat{H}_3$  обращается в ноль. Для  $l \neq 0$  ненулевой вклад даёт только поправка  $\delta\hat{H}_3$ . Отметим, что  $\delta\hat{H}_2$  и  $\delta\hat{H}_3$  имеют одинаковую спиновую природу. Это утверждение следует из соотношения (докажите):

$$\frac{i}{2} [\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}] = \hbar Q \left[ 2\pi\delta(\mathbf{r}) + \frac{\hat{\mathbf{l}} \cdot \boldsymbol{\sigma}}{r^3} \right],$$

где  $\boldsymbol{\mathcal{E}} = Q\mathbf{r}/r^3$ .

## 17.15. Релятивистские поправки к спектру в кулоновском поле

Займёмся теперь вычислением поправок к спектру электрона в кулоновском поле, связанных с различными членами в формуле (188). Энергию системы, которая описывается гамильтонианом  $\hat{H}$  и собственной функцией  $\Psi$ , можно записать как

$$E = \int dx \Psi^+(x) \hat{H} \Psi(x).$$



При малом изменении гамильтониана изменится его собственная волновая функция и соответствующая энергия:

$$\begin{aligned}
\delta E &= \int dx \delta\Psi^* \hat{H} \Psi + \int dx \Psi^* \delta\hat{H} \Psi + \int dx \Psi^* \hat{H} \delta\Psi = \\
&= E \int dx \delta\Psi^* \Psi + \int dx \Psi^* \delta\hat{H} \Psi + E \int dx \Psi^* \delta\Psi = \\
&= E \delta \left( \int dx \Psi^* \Psi \right) + \int dx \Psi^* \delta\hat{H} \Psi = \int dx \Psi^* \delta\hat{H} \Psi, \quad (203)
\end{aligned}$$

где мы воспользовались эрмитовостью гамильтониана и сохранением нормировки волновой функции. Таким образом, поправка к энергии равна среднему значению поправки к гамильтониану по невозмущённой волновой функции.

Нерелятивистский гамильтониан равен

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}.$$

Для дальнейших вычислений нам понадобятся средние от  $1/r$ ,  $1/r^2$ ,  $1/r^3$  (для  $l \neq 0$ ) и  $\delta(\mathbf{r})$  (для  $l = 0$ ) по собственным функциям  $\hat{H}_0$  с главным квантовым числом  $n$  и орбитальным моментом  $l$ .

Для вычисления  $\langle 1/r \rangle$  воспользуемся теоремой вириала:  $\langle U \rangle = 2E$ , где полная энергия  $E = -mZ^2e^4/(2\hbar^2n^2)$ . В результате получим, см. (118),

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{Z}{n^2 a_B}, \quad a_B = \frac{\hbar^2}{me^2}.$$

Для вычисления  $\langle 1/r^2 \rangle$  воспользуемся теоремой о дифференцировании по параметру:  $\partial E / \partial \lambda = \langle \partial \hat{H} / \partial \lambda \rangle$ . В качестве гамильтониана возьмём радиальный гамильтониан

$$\hat{H}_r = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}, \quad p_r = -\frac{i\hbar}{r} \frac{\partial}{\partial r} r,$$

а в качестве параметра — орбитальный момент  $l$  с учётом того, что  $n = n_r + l + 1$  (где  $n_r$  — радиальное квантовое число). В итоге получим, см. (119):

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{n^3(l+1/2) a_B^2}.$$

Для вычисления  $\langle 1/r^3 \rangle$  при  $l \neq 0$  воспользуемся теоремой  $\langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle = 0$ , где  $\hat{A}$  — произвольный оператор. В качестве гамильтониана возьмём  $\hat{H}_r$ , а в качестве оператора  $\hat{A}$  — радиальный импульс  $\hat{p}_r$ . Получаем

$$\left\langle \frac{\hbar^2 l(l+1)}{mr^3} \right\rangle = \left\langle \frac{Ze^2}{r^2} \right\rangle,$$

или, см. (120),

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{Z^3}{n^3 l(l+1)(l+1/2) a_B^3}, \quad l \neq 0.$$

Для вычисления  $\langle \delta(\mathbf{r}) \rangle = |\psi(0)|^2$  при  $l = 0$  воспользуемся той же теоремой, что и выше, с гамильтонианом  $\hat{H}_r$  и оператором  $\hat{A} = \partial/\partial r$ . Так как

$$\frac{\hat{p}_r^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right),$$

то при  $l = 0$

$$\left[ \hat{H}_r, \frac{\partial}{\partial r} \right] = -\frac{\hbar^2}{m r^2} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{Z e^2}{r^2}.$$

При  $l = 0$  волновая функция  $\psi(\mathbf{r})$  является вещественной величиной, не зависящей от углов. Поэтому

$$\int d^3 r \psi(r) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \psi(r) = 4\pi \int_0^\infty dr \psi(r) \frac{\partial}{\partial r} \psi(r) = 2\pi \int_0^\infty dr \frac{\partial}{\partial r} \psi^2(r) = -2\pi \psi^2(0).$$

Таким образом

$$\psi^2(0) = \frac{Z}{2\pi a_B} \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^3}{\pi n^3 a_B^3}.$$

Представим теперь оператор  $\delta\hat{H}_1$  в виде

$$\delta\hat{H}_1 = -\frac{(\hat{\mathbf{p}}^2)^2}{8m^3 c^2} = -\frac{1}{2mc^2} \left( \hat{H}_0 + \frac{Z e^2}{r} \right)^2. \quad (204)$$

Поэтому

$$\langle \delta\hat{H}_1 \rangle = -\frac{1}{2mc^2} \left( E^2 + 2EZ e^2 \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle + Z^2 e^4 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle \right). \quad (205)$$

Теперь, используя все найденные выше средние и соотношение

$$\langle \hat{\mathbf{l}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \rangle = \langle 2\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\mathbf{s}} \rangle = j(j+1) - l(l+1) - 3/4,$$

где  $j(j+1)$  — собственное значение оператора  $(\hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}})^2$ ,  $j = l \pm 1/2$ , находим полную релятивистскую поправку к спектру электрона в кулоновском поле:

$$\delta E = \langle \delta\hat{H} \rangle = -\frac{mZ^2 e^4 (Z\alpha)^2}{2\hbar^2 n^3} \left( \frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right), \quad (206)$$

где  $\alpha = e^2/(\hbar c) = 1/137$  — постоянная тонкой структуры (проверьте эту формулу!). Таким образом,  $\delta E/E \sim v^2/c^2 \sim (Z\alpha)^2$ .

**Задача 17.2.** 4-х вектор потенциала  $A^\nu$ , создаваемый магнитным моментом  $\boldsymbol{\mu}$  в его системе покоя, имеет вид

$$A^\nu = \left( 0, \frac{\boldsymbol{\mu} \times \mathbf{r}}{r^3} \right).$$

Найти  $A^\nu$  в системе, где магнитный момент движется со скоростью  $\mathbf{v}$  и сравнить в этой системе  $h_1 = QA^0$  с формулой (190) (с учётом соотношения  $\boldsymbol{\mathcal{E}} = Q\mathbf{r}/r^3$ ).

## 17.16. Спиральность

Рассмотрим теперь гамильтониан частицы в не зависящем от времени магнитном поле, описываемом потенциалом  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ ,

$$\hat{H} = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathcal{P}} + Mc^2\gamma^0, \quad \hat{\mathcal{P}} = \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (207)$$

С учётом того, что  $[\gamma^0, \boldsymbol{\Sigma}] = 0$  и  $[\gamma^5, \boldsymbol{\alpha}] = 0$ , получаем

$$[\hat{H}, \boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\mathcal{P}}] = -c[\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathcal{P}}, \gamma^5 \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathcal{P}}] = 0. \quad (208)$$

Кроме того, так как  $\gamma^0 \boldsymbol{\alpha} + \boldsymbol{\alpha} \gamma^0 = 0$ , то

$$\hat{H}^2 = c^2(\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathcal{P}})^2 + M^2c^4 = c^2(\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\mathcal{P}})^2 + M^2c^4.$$

Поэтому в постоянном магнитном поле в состоянии с определённой энергией можно интерпретировать  $\hat{\Lambda} = c\boldsymbol{\Sigma} \cdot \hat{\mathcal{P}}/\sqrt{\hat{H}^2 - M^2c^4}$  как проекцию оператора спина на оператор кинетического импульса  $\hat{\mathcal{P}}$ . Заметим, что в магнитном поле этот оператор не коммутирует с гамильтонианом обобщённого уравнения Дирака, описывающего частицу с ненулевым аномальным магнитным моментом. Поскольку  $\hat{\Lambda}^2 = 1$ , то собственные значения  $\hat{\Lambda}$  равны  $\pm 1$ . Говорят, что частица находится в состоянии с определённой спиральностью, если волновая функция  $\Psi$  является одновременно собственной функцией  $\hat{H}$  и  $\hat{\Lambda}$ .

## 17.17. Парадокс Клейна

Чтобы продемонстрировать ограниченность применимости уравнения Дирака в сильных полях, рассмотрим задачу одномерного рассеяния в потенциале  $u(x) = u_0\vartheta(x)$ , где  $u_0 > 2Mc^2$ . Будем считать, что волна падает слева направо с энергией  $\varepsilon$  в интервале  $Mc^2 < \varepsilon < u_0 - Mc^2$ . Решение уравнения Дирака при  $x < 0$  запишем в виде

$$\psi_{<}(x) = \begin{pmatrix} \phi_1 \\ \frac{c\sigma^1 p}{\varepsilon + Mc^2} \phi_1 \end{pmatrix} e^{ipx/\hbar} + A \begin{pmatrix} \phi_2 \\ -\frac{c\sigma^1 p}{\varepsilon + Mc^2} \phi_2 \end{pmatrix} e^{-ipx/\hbar}, \quad (209)$$

$$p = \frac{1}{c}\sqrt{\varepsilon^2 - M^2c^4},$$

а при  $x > 0$

$$\psi_{>}(x) = B \left( \begin{array}{c} \phi_3 \\ c \sigma^1 P \\ \varepsilon + M c^2 - u_0 \end{array} \phi_3 \right) e^{i P x / \hbar}, \quad (210)$$

$$P = \frac{1}{c} \sqrt{(u_0 - \varepsilon)^2 - M^2 c^4}.$$

Заметим, что для  $M c^2 < \varepsilon < u_0 - M c^2$  импульс частицы  $P$  при  $x > 0$  и  $\varepsilon < u_0$  является вещественной величиной!

Так как уравнение Дирака является дифференциальным уравнением первого порядка, то в точке  $x = 0$  есть только одно условие  $\psi_{<}(0) = \psi_{>}(0)$ . Из этого условия находим  $\phi_1 = \phi_2 = \phi_3$  и

$$A = \frac{1 + C}{1 - C}, \quad B = \frac{2}{1 - C}, \quad C = \frac{(\varepsilon + M c^2) P}{(u_0 - \varepsilon - M c^2) p} > 0. \quad (211)$$

Отсюда видно, что отношение падающего тока к отражённому равно  $R = |A|^2 > 1$ , а отношение прошедшего тока к падающему равно  $T = 1 - R < 0$ . Таким образом, при  $x > 0$  ток направлен в сторону, противоположную импульсу! Это так называемый парадокс Клейна. Объяснение парадокса состоит в том, что при  $u_0 > 2 M c^2$  происходит спонтанное рождение пары частица-античастица, что усиливает поток частиц, бегущих назад. Следовательно, при  $u_0 > 2 M c^2$  использование уравнения Дирака для описания одной частицы теряет смысл.

## РАЗДЕЛ 18. ТРЁХМЕРНОЕ РАССЕЙАНИЕ НЕРЕЛЯТИВИСТСКИХ ЧАСТИЦ

Если потенциал  $u(\mathbf{r}) \rightarrow 0$  при  $r \rightarrow \infty$ , то возможен процесс рассеяния, когда частица с импульсом  $\mathbf{p}_1$  при  $t \rightarrow -\infty$  имеет импульс  $\mathbf{p}_2$  при  $t \rightarrow \infty$ . В этом разделе мы рассмотрим общую постановку задачи рассеяния и приближенные методы описания этого процесса.

### 18.1. Амплитуда рассеяния и сечение рассеяния

Для описания процесса рассеяния в нерелятивистской квантовой механике перепишем стационарное уравнение Шредингера в виде

$$(\Delta + k^2) \psi(\mathbf{r}) = \frac{2Mu(\mathbf{r})}{\hbar^2} \psi(\mathbf{r}), \quad k = \frac{\sqrt{2M\varepsilon}}{\hbar}.$$

Это дифференциальное уравнение можно переписать в интегральном виде, который учитывает, что рассеянная волна является расходящейся при  $r \rightarrow \infty$  и затухает как  $1/r$  (что является следствием сохранения потока частиц):

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}) - \frac{M}{2\pi\hbar^2} \int \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} u(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3r', \quad (212)$$

где  $\mathbf{k}_1 = \mathbf{p}_1/\hbar$  и  $k = |\mathbf{k}_1|$ . В интеграле  $r' \sim a$ , где  $a$  — характерный радиус действия потенциала. При  $r \gg a$  имеем:  $r \gg r'$  и  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'$ , где  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ . Поэтому при  $r \gg a$  асимптотика волновой функции имеет вид

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}) + f(\mathbf{n}) \frac{\exp(ikr)}{r}, \\ f(\mathbf{n}) &= -\frac{M}{2\pi\hbar^2} \int \exp(-ik\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3r'. \end{aligned} \quad (213)$$

Здесь функция  $f(\mathbf{n})$  называется амплитудой рассеяния, она имеет размерность длины. Радиальный ток, соответствующий рассеянной волне, равен  $J_r = v |f(\mathbf{n})|^2 / r^2$ , где  $v = \hbar k / M$ . Ток, соответствующий падающей волне, равен  $J_0 = v$ . Поток рассеянной волны через площадку  $dS = r^2 d\Omega$ , где  $d\Omega$  — дифференциал телесного угла, равен  $d\Phi = J_r dS = v |f(\mathbf{n})|^2 d\Omega$ . Дифференциальное сечение упругого рассеяния определяется формулой  $J_0 d\sigma = d\Phi$ , т. е.

$$d\sigma = |f(\mathbf{n})|^2 d\Omega. \quad (214)$$

В классической механике сечение рассеяния определяется формулой  $d\sigma = \rho d\rho d\phi$ , где  $\rho$  — прицельный параметр. Если потенциал везде отличен от нуля, то полное классическое сечение равно бесконечности, вне зависимости от скорости падения потенциала с ростом  $r$ . В квантовой механике это

не так. Расходимость полного сечения связана с рассеянием на малые углы на больших прицельных параметрах. В квантовой механике нельзя определить прицельный параметр, так как в силу соотношения неопределённостей разброс прицельных параметров  $\Delta\rho$  приводит к неопределённости поперечного импульса  $\Delta p_{\perp} \sim \hbar/\Delta\rho \gtrsim \hbar/\rho$  и, следовательно, к неопределённости угла рассеяния  $\Delta\vartheta \sim \Delta p_{\perp}/p \gtrsim \hbar/(p\rho)$ . Изменение классического импульса при рассеянии на больших прицельных параметрах и соответствующий угол рассеяния  $\vartheta_{cl}$  можно оценить из закона Ньютона:

$$\delta p_{\perp} \sim F \delta t \sim u'(\rho) (\rho/v), \quad \vartheta_{cl} \sim \delta p_{\perp}/p \sim u'(\rho)\rho/(vp).$$

Если  $\Delta\vartheta \gtrsim \vartheta_{cl}$ , то квазиклассический язык теряет смысл. Если на больших расстояниях  $u(r) \sim g/r^{\beta}$ , где  $g$  и  $\beta$  — некоторые числа, то указанное неравенство приобретает вид  $\hbar/\rho \gtrsim g/(v\rho^{\beta})$ . Таким образом, если  $\beta > 1$ , то квазиклассическое описание рассеяния на достаточно малые углы теряет смысл. Однако, как мы увидим, полное квантовое сечение становится конечным, если потенциал на больших расстояниях убывает быстрее  $1/r^2$ , а не  $1/r$ .

## 18.2. Борновское приближение

При определённых условиях модуль разницы  $\delta\psi(\mathbf{r})$  между точным решением  $\psi(\mathbf{r})$  уравнения (212) и плоской волной  $\exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r})$  мал для любых  $\mathbf{r}$ . В этом случае можно заменить в интеграле в формуле (213)  $\psi(\mathbf{r}')$  на  $\exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}')$  и приближённо вычислить амплитуду рассеяния по формуле Борна:

$$f(\mathbf{n}) = -\frac{M}{2\pi\hbar^2} \int \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}') u(\mathbf{r}') d^3r', \quad (215)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1, \quad k_2 = k n.$$

Если при больших  $r$  потенциал убывает быстрее, чем  $1/r^3$ , то амплитуда рассеяния является конечной при любых углах. Если потенциал убывает медленнее, чем  $1/r^3$ , то амплитуда рассеяния возрастает при угле рассеяния  $\vartheta \rightarrow 0$ . Предположим, что  $u(r) \propto 1/r^{\beta}$  при  $r \rightarrow \infty$ . Тогда при  $\beta < 3$  имеем  $f \propto 1/q^{3-\beta} \propto 1/\vartheta^{3-\beta}$ . Следовательно, интеграл  $\int |f|^2 d\Omega \propto \int \vartheta d\vartheta/\vartheta^{6-2\beta}$  сходится на маленьких  $\vartheta$  при  $\beta > 2$ .

Обсудим условия применимости борновского приближения.

1. Если  $ka \ll 1$  (медленные частицы, длина волны де Бройля много больше размера потенциала), то из (212) следует, что должно выполняться условие  $\bar{u} \ll \hbar^2/(Ma^2)$ , что соответствует условию мелкой ямы,  $\bar{u}$  — характерный масштаб потенциала.
2. Если  $ka \gg 1$  (быстрые частицы, длина волны де Бройля много меньше размера потенциала), то должно выполняться условие  $\bar{u} \ll (ka)\hbar^2/(Ma^2)$ .

Для проверки этого условия оценим  $\delta\psi(0)$ , где следует ожидать самое большое значение  $\delta\psi(r)$ :

$$\begin{aligned}\delta\psi(0) &\sim \frac{M}{\hbar^2} \int \exp[i(kr' + \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}')] \frac{u(r')}{r'} d^3r' \sim \\ &\sim \frac{M}{\hbar^2} \iint \exp[ikr'(1 + \cos\vartheta)] u(r') r' dr' \sin\vartheta d\vartheta \sim \\ &\sim \frac{M}{\hbar^2 k} \int u(r') dr' \sim \frac{M\bar{u}a}{\hbar^2 k} \ll 1,\end{aligned}\quad (216)$$

здесь сначала был взят интеграл по углам, а затем опущен вклад с быстро-осциллирующей экспонентой  $\exp(2ikr)$ . Для кулоновского потенциала  $u = -Ze^2/r$  имеем  $\bar{u} \sim Ze^2/a$  и критерий применимости борновского приближения имеет вид

$$\frac{MZe^2}{\hbar^2 k} = \frac{MZe^2}{\hbar p} = \frac{Ze^2}{\hbar v} \ll 1,$$

т. е. скорость частицы много больше атомной,  $v \gg Ze^2/\hbar$ . В кулоновском поле притяжения амплитуда рассеяния в борновском приближении равна

$$f_C(\mathbf{n}) = \frac{2MZe^2}{\hbar^2 \mathbf{q}^2} = \frac{2MZe^2}{|\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1|^2}, \quad (217)$$

где  $\mathbf{p}_2 = p\mathbf{n}$ , мы воспользовались тем, что преобразование Фурье от  $1/r$  равно  $4\pi/\mathbf{q}^2$ . Дифференциальное сечение рассеяния, выраженное через  $f_C$ , совпадает с классической формулой Резерфорда:

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \left| \frac{2MZe^2}{\hbar^2 \mathbf{q}^2} \right|^2 = \left( \frac{Ze^2 M}{2p^2} \right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)}. \quad (218)$$

Если мы имеем дело с рассеянием электрона на атоме, то потенциальная энергия  $u(\mathbf{r})$  удовлетворяет уравнению Пуассона

$$\Delta u(\mathbf{r}) = -4\pi e^2 [n(\mathbf{r}) - Z\delta(r)],$$

где  $n(\mathbf{r})$  — плотность электронов в атоме. Поэтому преобразование Фурье потенциальной энергии и амплитуда рассеяния в борновском приближении равны

$$u_{\mathbf{q}} = -\frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2} [Z - \mathcal{F}(\mathbf{q})], \quad f(\mathbf{q}) = \frac{2Me^2}{\hbar^2 \mathbf{q}^2} [Z - \mathcal{F}(\mathbf{q})],$$

где  $\mathcal{F}(\mathbf{q}) = n_{\mathbf{q}} = \int d^3r e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} n(\mathbf{r})$  называется атомным формфактором. Для нейтрального атома  $\mathcal{F}(0) = Z$ , и полное сечение рассеяния на нейтральном атоме конечно.

### 18.3. Эйкональное приближение

Если  $ka \gg 1$ , энергия частицы  $E = \hbar^2 k^2 / (2M)$  велика по сравнению с характерной величиной потенциала  $\bar{u}$ , и выполняется неравенство

$$E \equiv \frac{\hbar^2}{2Ma^2} (ka)^2 \gg \bar{u} \gg \frac{\hbar^2}{Ma^2} (ka),$$

то борновское приближение не применимо, но применимо так называемое эйкональное приближение. Представим волновую функцию в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}) \exp(ikz), \quad (219)$$

где ось  $z$  направлена вдоль вектора  $\mathbf{k}_1$  и  $F(\mathbf{r}) \rightarrow 1$  при  $z \rightarrow -\infty$ . Будем считать, что  $|\nabla_{\perp} F(\mathbf{r})| \ll k|F(\mathbf{r})|$ , т. е.  $q_{\perp} \ll k$  (малые углы рассеяния), где индекс  $\perp$  обозначает компоненты вектора, перпендикулярные направлению  $\mathbf{k}_1$ . Тогда из уравнения Шредингера получаем

$$2ik \frac{\partial}{\partial z} F(\mathbf{r}) = \frac{2M u(\mathbf{r})}{\hbar^2} F(\mathbf{r}),$$

т. е.

$$F(\mathbf{r}) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^z u(\boldsymbol{\rho}, z') dz' \right],$$

где  $\boldsymbol{\rho}$  — компоненты вектора  $\mathbf{r}$ , перпендикулярные оси  $z$ . Подставив (219) в (213) и пренебрегая в фазе слагаемым  $(k_{2z} - k_{1z})z \sim k_{\perp}^2 a / k \sim 1 / (ka) \ll 1$ , получаем

$$\begin{aligned} f(\mathbf{n}) &= -\frac{M}{2\pi\hbar^2} \int d^2\rho \int_{-\infty}^{\infty} dz' e^{-i\mathbf{q}_{\perp} \cdot \boldsymbol{\rho}} u(\boldsymbol{\rho}, z') e^{-\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{z'} u(\boldsymbol{\rho}, z'') dz''} = \\ &= -\frac{M}{2\pi\hbar^2} \int d^2\rho \int_{-\infty}^{\infty} dz' e^{-i\mathbf{q}_{\perp} \cdot \boldsymbol{\rho}} i\hbar v \frac{\partial}{\partial z'} e^{-\frac{i}{\hbar v} \int_{-\infty}^{z'} u(\boldsymbol{\rho}, z'') dz''} = \\ &= \frac{ik}{2\pi} \int d^2\rho e^{-i\mathbf{q}_{\perp} \cdot \boldsymbol{\rho}} \{1 - e^{-i\chi(\boldsymbol{\rho})}\}, \quad \chi(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{\hbar v} \int_{-\infty}^{\infty} u(\boldsymbol{\rho}, z') dz'. \end{aligned} \quad (220)$$

Полученная формула очень удобна для вычисления амплитуды рассеяния быстрых частиц при малых углах рассеяния.

### 18.4. Оптическая теорема

Для вычисления полного сечения рассеяния (если оно существует) удобно использовать так называемую оптическую теорему. Для её доказательства используем эрмитовость гамильтониана  $\hat{H}$  при действии на функции, имеющие конечную нормировку. Функции непрерывного спектра конечной нормировкой не обладают. Поэтому введём функцию  $\Psi_{\lambda}(\mathbf{r}) = \exp(-\lambda r) \psi(\mathbf{r})$



с бесконечно малой  $\lambda$  и решением уравнения Шредингера  $\psi(\mathbf{r})$ , имеющим асимптотику, соответствующую задаче рассеяния. Тогда из эрмитовости гамильтониана следует, что

$$\int [\hat{H}\Psi_\lambda(\mathbf{r})]^* \Psi_\lambda(\mathbf{r}) d^3r = \int \Psi_\lambda^*(\mathbf{r}) \hat{H}\Psi_\lambda(\mathbf{r}) d^3r.$$

Используя уравнение Шредингера, получаем

$$\begin{aligned} \lambda \int e^{-2\lambda r} [\mathbf{n} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r})]^* \psi(\mathbf{r}) d^3r &= \lambda \int e^{-2\lambda r} \psi^*(\mathbf{r}) [\mathbf{n} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r})] d^3r \Rightarrow \\ \Rightarrow \operatorname{Im} \left\{ \lambda \int e^{-2\lambda r} \psi^*(\mathbf{r}) [\mathbf{n} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r})] d^3r \right\} &= 0. \end{aligned}$$

Основной вклад в интеграл при  $\lambda \rightarrow 0$  определяется областью больших расстояний  $r \sim 1/\lambda$ . Поэтому можно заменить волновую функцию  $\psi(\mathbf{r})$  на её асимптотическое значение, получаем

$$\begin{aligned} \lambda \operatorname{Re} \int \exp(-2\lambda r) \left\{ \frac{k|f(\mathbf{n})|^2}{r^2} + \frac{k f(\mathbf{n})}{r} \exp[i(kr - \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r})] + \right. \\ \left. + \frac{(\mathbf{n} \cdot \mathbf{k}_1) f^*(\mathbf{n})}{r} \exp[-i(kr - \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r})] \right\} r^2 dr d\Omega = 0. \end{aligned} \quad (221)$$

Во втором и третьем слагаемом подынтегрального выражения основной вклад в интеграл определяется малыми углами между векторами  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{k}_1$ , так что в этих членах можно положить  $f(\mathbf{n}) = f(\mathbf{k}_1/k)$  и  $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{k}_1) = k$ . Беря в первом члене интеграл по  $dr$ , а во втором и третьем членах по  $dr d\Omega$ , получаем оптическую теорему

$$\sigma = \int |f(\mathbf{n})|^2 d\Omega = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im} f(\mathbf{k}_1/k). \quad (222)$$

Таким образом, полное сечение пропорционально мнимой части амплитуды рассеяния вперёд (на нулевой угол).

Поскольку в борновском приближении сечение квадратично по потенциалу, а амплитуда рассеяния линейна по потенциалу, то в этом приближении  $\operatorname{Im} f(\mathbf{k}_1/k) = 0$ , и для вычисления  $\operatorname{Im} f(\mathbf{k}_1/k)$  необходимо искать поправку к борновскому приближению. Используя оптическую теорему и эйкональное приближение для амплитуды рассеяния, получим

$$\sigma = 2 \int [1 - \cos \chi(\boldsymbol{\rho})] d^2\rho. \quad (223)$$

В качестве примера рассмотрим рассеяние быстрой частицы на потенциальной яме радиуса  $a$  и глубины  $u_0$ . При  $\rho < a$  фаза  $\chi(\rho)$  равна

$$\chi(\rho) = -\frac{u_0}{\hbar v} \int_{-\sqrt{a^2-\rho^2}}^{\sqrt{a^2-\rho^2}} dz = -\frac{2u_0\sqrt{a^2-\rho^2}}{\hbar v},$$

а при  $\rho > a$  фаза  $\chi(\rho) = 0$ . Для полного сечения получаем

$$\begin{aligned}\sigma &= 4\pi \int_0^a \left[ 1 - \cos \left( \frac{2u_0 \sqrt{a^2 - \rho^2}}{\hbar v} \right) \right] \rho d\rho = \\ &= 2\pi a^2 \left[ 1 - \frac{\sin(2\gamma)}{\gamma} + \frac{\sin^2 \gamma}{\gamma^2} \right], \quad \gamma = \frac{u_0 a}{\hbar v}.\end{aligned}\quad (224)$$

При  $\gamma \ll 1$  сечение —  $\sigma = 2\pi a^2 \gamma^2$ . При  $\gamma \gg 1$  сечение —  $\sigma = 2\pi a^2$  в 2 раза больше геометрического сечения шара, т. е. в два раза больше классического рассеяния на шаре! Дополнительный вклад  $\pi a^2$  связан с рассеянием волн с прицельными параметрами  $\rho \sim a$ . При этом углы рассеяния  $\theta \sim \hbar/(ap)$ . Чтобы наблюдать этот вклад, необходимо экран поставить на расстоянии  $L \sim a/\theta \sim pa^2/\hbar$ . При макроскопических значениях  $p$  и  $a$  величина  $L$  будет огромной из-за малости постоянной Планка. Поэтому наблюдать эффект дифракционного рассеяния возможно только в микромире.

## 18.5. Борновское приближение для рассеяния релятивистских частиц в потенциале. Рассеяние быстрого электрона в кулоновском поле

Представим решение уравнение Дирака в следующем виде:  $\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r})U + \delta\psi(\mathbf{r})$ , где  $U$  — дираковский спинор (158), а  $\delta\psi(\mathbf{r})$  удовлетворяет уравнению

$$[\gamma^0 \varepsilon - c \boldsymbol{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{p}} - Mc^2 I] \delta\psi(\mathbf{r}) = \gamma^0 u(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}) U.$$

Поддействовав на обе части этого уравнения оператором  $[\gamma^0 \varepsilon - c \boldsymbol{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{p}} + Mc^2 I]$ , получим

$$(\Delta + k^2) \delta\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\hbar^2 c^2} [\gamma^0 \varepsilon - c \boldsymbol{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{p}} + Mc^2 I] \gamma^0 u(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}) U, \quad (225)$$

или

$$\begin{aligned}\delta\psi(\mathbf{r}) &= -\frac{1}{4\pi\hbar^2 c^2} \int d^3 r' \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} [\gamma^0 \varepsilon - c \boldsymbol{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{p}}' + Mc^2 I] \times \\ &\times \gamma^0 u(\mathbf{r}') \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}') U.\end{aligned}\quad (226)$$

При больших  $r \gg a$  имеем  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = r - \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'$ , так что

$$\begin{aligned}\delta\psi(\mathbf{r}) &= \frac{\exp(ikr)}{r} F, \\ F &= -\frac{u_q}{4\pi\hbar^2 c^2} [\gamma^0 \varepsilon - c \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p}_2 + Mc^2 I] \gamma^0 U, \\ \mathbf{p}_2 &= p \mathbf{n}, \quad \mathbf{q} = (\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1)/\hbar, \quad u_q = \int d^3 r' \exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}') u(\mathbf{r}').\end{aligned}\quad (227)$$

При вычислении  $F$  мы воспользовались эрмитовостью оператора  $\hat{\mathbf{p}}'$  и подействовали им налево. Подставив явный вид  $U$ , преобразуем  $F$  к виду

$$F = -\frac{\varepsilon u_{\mathbf{q}}}{2\pi\hbar^2 c^2} \sqrt{1 - \beta^2 \sin^2(\theta/2)} U', \quad U' = \sqrt{\frac{\varepsilon + Mc^2}{2\varepsilon}} \left( \frac{c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}_2}{\varepsilon + Mc^2} \phi' \right),$$

$$\phi' = \exp\left(i\frac{\alpha}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nu}\right) \phi, \quad \operatorname{tg} \frac{\alpha}{2} = \frac{(\varepsilon - Mc^2) \operatorname{tg}(\theta/2)}{\varepsilon + Mc^2 \operatorname{tg}^2(\theta/2)}, \quad (228)$$

$$\beta = cp/\varepsilon, \quad \boldsymbol{\nu} = \frac{[\mathbf{n}_2 \times \mathbf{n}_1]}{\sin \theta}, \quad \cos \theta = \mathbf{n}_2 \cdot \mathbf{n}_1.$$

Радиальный ток  $J_r$  равен  $J_r = c\beta F^+ F/r^2$ , а падающий ток  $J_0 = c\beta$ , сечение рассеяния равно

$$d\sigma = \frac{J_r r^2 d\Omega}{J_0} = \left| \frac{\varepsilon u_{\mathbf{q}}}{2\pi\hbar^2 c^2} \right|^2 [1 - \beta^2 \sin^2(\theta/2)] d\Omega. \quad (229)$$

Сечение рассеяния  $d\sigma^{(0)}$  частицы со спином ноль, полученное в борновском приближении, равно

$$d\sigma^{(0)} = \left| \frac{\varepsilon u_{\mathbf{q}}}{2\pi\hbar^2 c^2} \right|^2 d\Omega.$$

Таким образом, наличие спина  $1/2$  приводит к дополнительному множителю  $[1 - \beta^2 \sin^2(\theta/2)]$ . Из формулы для  $\phi'$  в (228) следует, что направление спина рассеянной частицы получается из направления спина начальной частицы поворотом на угол  $\alpha$  вокруг оси  $\boldsymbol{\nu}$ , перпендикулярной плоскости рассеяния. Для ультрарелятивистской частицы  $\alpha \approx \theta$  за исключением углов вблизи  $\theta = \pi$ . Если начальная частица находилась в состоянии с определённой спиральностью, то вероятность  $W_1$  конечной частицы иметь ту же спиральность и вероятность  $W_{-1}$  иметь противоположную спиральность равны

$$W_1 = \cos^2(\theta/2 - \alpha/2) = \frac{1}{1 + \left(\frac{Mc^2}{\varepsilon} \operatorname{tg}(\theta/2)\right)^2}, \quad W_{-1} = 1 - W_1.$$

Для ультрарелятивистских частиц  $W_1 \approx 1$  и  $W_{-1} \propto (Mc^2/\varepsilon)^2$  за исключением углов рассеяния вблизи  $\theta = \pi$ . Для  $\theta = \pi$  имеем  $W_1 = 0$ . Таким образом, мы имеем закон сохранения спиральности для рассеяния ультрарелятивистских частиц, кроме случая рассеяния назад. Заметим, что сечение рассеяния назад для частиц со спином  $1/2$  подавлено множителем  $(Mc^2/\varepsilon)^2$ , по сравнению с сечением рассеяния назад частиц со спином ноль.

## РАЗДЕЛ 19. РАССЕЙАНИЕ В СФЕРИЧЕСКИ-СИММЕТРИЧНОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

До сих пор мы не предполагали, что потенциал является сферически-симметричным. Наличие сферической симметрии у потенциала позволяет использовать так называемую фазовую теорию рассеяния, которую мы рассмотрим в нерелятивистском случае.

### 19.1. Фазовая теория рассеяния

Для сферически-симметричного потенциала  $u(r)$  сохраняется угловой момент  $l$  и проекция углового момента  $l_z = m$ . Решение уравнения Шредингера в непрерывном спектре с определёнными  $l$  и  $m$  имеет вид  $\psi_{lm}(\mathbf{r}) = Y_{lm}(\mathbf{n}) R_l(r)$ , где радиальная волновая функция на больших расстояниях имеет вид

$$R_l(r) \approx (2/r) \sin(kr - l\pi/2 + \delta_l),$$

где  $\delta_l$  называется фазой рассеяния. Радиальное решение свободного уравнения Шредингера имеет вид  $R_l^{(0)}(r) = 2k j_l(kr)$ , где  $j_l(x)$  — сферическая функция Бесселя, асимптотика которой на больших расстояниях равна

$$j_l(x) \approx \frac{1}{x} \sin(x - l\pi/2).$$

В задаче рассеяния падающая плоская волна  $\exp(ikz)$  не обладает определённым  $l$ , но обладает определённым  $m = 0$ , так как является инвариантной относительно поворотов вокруг оси  $z$ . Следовательно,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l Y_{l0}(\mathbf{n}) R_l(r) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) R_l(r),$$

где  $A_l$  — некоторые коэффициенты. Чтобы найти эти коэффициенты, учтём, что на больших расстояниях

$$\delta\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) - \exp(ikz) \approx f(\theta) \frac{\exp(ikr)}{r}$$

содержит только расходящуюся сферическую волну. Используя формулу

$$\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) j_l(kr)$$

и асимптотику радиальных волновых функций, находим

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) e^{i\delta_l} R_l(r), \\ f(\theta) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \theta), \quad f_l = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l} - 1). \end{aligned} \tag{230}$$

Таким образом, для нахождения амплитуды рассеяния необходимо найти решение  $R_l(r)$  радиального уравнения Шредингера, определить фазу рассеяния  $\delta_l$  из асимптотики этого решения на больших расстояниях и подставить в формулу (230) для  $f(\theta)$ .

Если полное сечение конечно, то оно равно

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |f_l|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l. \quad (231)$$

Сходимость суммы определяется поведением фаз рассеяния при больших  $l$ , при которых для описания радиальной волновой функции можно использовать квазиклассическое приближение. Для свободного движения имеем

$$R_l^{(0)}(r) \approx (2/r) \sin \left( \int_{r_0}^r \sqrt{k^2 - (l+1/2)^2/x^2} dx + \pi/4 \right), \quad r_0 = (l+1/2)/k.$$

При больших  $kr/l$  аргумент синуса равен  $kr - l\pi/2$ . Для ненулевого потенциала

$$R_l(r) \approx (2/r) \sin \left( \int_{r_1}^r \sqrt{k^2 - (l+1/2)^2/x^2 - 2Mu(x)/\hbar^2} dx + \pi/4 \right),$$

где в точке  $r_1$  корень обращается в ноль. Таким образом, для квазиклассической фазы рассеяния имеем

$$\delta_l = -\frac{M}{\hbar^2} \int_{r_0}^{\infty} \frac{u(x)}{\sqrt{k^2 - (l+1/2)^2/x^2}} dx. \quad (232)$$

Для того, чтобы фаза рассеяния была конечной, необходимо, чтобы потенциал при больших  $r$  убывал быстрее, чем  $1/r$ . В этом случае при больших  $l$  имеем

$$\delta_l \sim -\frac{M}{k\hbar^2} r_0 u(r_0), \quad r_0 = l/k.$$

При больших  $l$  фаза рассеяния мала, и сходимость суммы в (231) определяется сходимостью величин

$$\sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \delta_l^2 \sim \int_1^{\infty} 2l \delta_l^2 dl.$$

Если  $u(r) \propto 1/r^\beta$  при больших  $r$ , то  $\delta_l \propto 1/l^{\beta-1}$  и интеграл сходится при  $\beta > 2$ , т. е. полное сечение конечно, если потенциал убывает быстрее, чем  $1/r^2$ .

## 19.2. Рассеяние медленных частиц

Запишем уравнение Шредингера для функции  $\chi_l(r) = rR_l(r)$  частицы в потенциале  $u(r)$  и для свободной функции  $\chi_l^{(0)}(r) = rR_l^{(0)}(r)$ , умножим первое уравнение на  $\chi_l^{(0)}(r)$ , второе уравнение — на  $\chi_l(r)$  и вычтем из первого уравнения второе. В результате получим

$$\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d}{dr} \left[ \chi_l^{(0)}(r) \chi_l'(r) - \chi_l^{(0)'}(r) \chi_l(r) \right] = u(r) \chi_l^{(0)}(r) \chi_l(r).$$

Возьмём интеграл от левой и правой части по  $r$  от нуля до бесконечности с учётом асимптотики волновых функций на бесконечности:

$$\sin \delta_l = -\frac{M}{2\hbar^2 k} \int_0^\infty u(r) R_l^{(0)}(r) R_l(r) r^2 dr.$$

Для медленных частиц ( $ka \ll 1$ ,  $a$  — характерный размер потенциала) на расстояниях  $r \sim a$  волновые функции имеют асимптотику  $R(r) \propto k(kr)^l$  и  $R^{(0)}(r) \propto k(kr)^l$ . Поэтому для медленных частиц  $\delta_l \propto (ka)^{2l+1}$  и рассеяние определяется орбитальным моментом  $l = 0$ ,

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

В пределе  $k \rightarrow 0$  фаза рассеяния имеет вид  $\delta_0 = -ka_0$ , где  $a_0$  называется длиной рассеяния и определяется параметрами потенциала. Таким образом, в пределе  $k \rightarrow 0$

$$\sigma = 4\pi a_0^2.$$

Заметим, что  $|a_0|$  может быть много больше  $a$  (характерного радиуса действия потенциала). В этом случае определим фазу  $\delta_0$  с помощью соотношения  $\operatorname{tg} \delta_0 = -ka_0$ . Для того чтобы вычислить сечение в случае  $1/a_0 \lesssim k \ll 1/a$ , представим  $f_0$  в виде

$$f_0 = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_0} - 1) \equiv \frac{1}{k(\operatorname{ctg} \delta_0 - i)} \approx -\frac{a_0}{1 + ika_0},$$

тогда сечение будет иметь вид

$$\sigma = \frac{4\pi a_0^2}{1 + k^2 a_0^2} = \frac{2\pi \hbar^2}{m(\varepsilon + E)}, \quad \varepsilon = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}.$$

Таким образом, мы имеем пик в сечении с шириной  $\delta E \sim \varepsilon$ .

В качестве примера рассмотрим рассеяние медленных частиц в потенциале  $u(r) = -u_0 \theta(a - r)$ . Функция  $\chi_0(r)$  имеет вид

$$\chi_0(r) = A \sin(\kappa r) \quad \text{при } r < a, \quad \chi_0(r) = \sin(kr + \delta_0) \quad \text{при } r > a,$$

где  $\kappa = \sqrt{2M(E + u_0)}/\hbar$ . Используя непрерывность функции  $\chi_0(r)$  и её производной в точке  $r = a$ , получаем уравнение на фазу  $\delta_0$ :

$$\operatorname{tg}(ka + \delta_0) = \frac{k}{\kappa} \operatorname{tg}(\kappa a).$$

Отсюда находим длину рассеяния:

$$a_0 = a \left[ 1 - \frac{\operatorname{tg}(\kappa_0 a)}{\kappa_0 a} \right], \quad \kappa_0 = \frac{\sqrt{2Mu_0}}{\hbar}.$$

Если  $\kappa_0 a \gg 1$  и  $\operatorname{tg}(\kappa_0 a) \sim 1$ , то  $a_0 \approx -a$  и сечение рассеяния равно  $\sigma = 4\pi a^2$ . Для того чтобы выполнялось соотношение  $|a_0| \gg a$ , необходимо, чтобы значение  $\kappa_0 a$  находилось вблизи точек  $\pi/2 + n\pi$ . Условие  $\kappa a = \pi/2 + n\pi$  соответствует условию возникновения связанного состояния с энергией равной нулю. При этом, если  $1 \gg \kappa a - (\pi/2 + n\pi) > 0$ , то  $a_0 > 0$ , а если  $-1 \ll \kappa a - (\pi/2 + n\pi) < 0$ , то  $a_0 < 0$ . В обоих случаях  $|a_0| \gg a$  и сечение рассеяния велико при низкой энергии, так как не зависит от знака  $a_0$ . При  $|a_0| \gg a$  и  $a_0 < 0$  говорят о рассеянии на виртуальном уровне, так как есть резонанс в рассеянии, а уровня с энергией связи близкой к нулю нет. В случае рассеяния на мелком уровне ( $a_0 > 0$ ,  $a_0 \gg a$ ) длина рассеяния сравнима с размером волновой функции связанного состояния.

### 19.3. Резонансное рассеяние

Рассмотрим функцию энергии  $a_l(E) = \exp[i\delta_l(E)]$  как функцию комплексной переменной  $E$ . Предположим, что в точке  $E_R - i\Gamma/2$  эта функция имеет полюс первого порядка, т. е. вблизи этой точки мы можем написать  $a_l(E) = b_l/[E - (E_R - i\Gamma/2)]$ , где  $b_l$  — некоторое число. Тогда амплитуда рассеяния  $f_l$  равна

$$\begin{aligned} f_l &= \frac{1}{2ik} \left[ \frac{a_l}{a_l^*} - 1 \right] = \frac{1}{2ik} \left\{ \frac{b_l}{b_l^*} \left[ \frac{E - (E_R + i\Gamma/2)}{E - (E_R - i\Gamma/2)} - 1 \right] + \frac{b_l}{b_l^*} - 1 \right\} = \\ &= f_l^{(0)} - \frac{1}{2k} \frac{\Gamma}{E - (E_R - i\Gamma/2)} \exp(2i\delta_l^{(0)}), \\ f_l^{(0)} &= \frac{1}{2ik} \left[ \exp(2i\delta_l^{(0)}) - 1 \right], \quad \exp(2i\delta_l^{(0)}) = \frac{b_l}{b_l^*}. \end{aligned} \quad (233)$$

Сечение рассеяния вблизи резонанса равно

$$\sigma = 4\pi(2l + 1)|f_l|^2 \approx \frac{\pi}{k^2} (2l + 1) \frac{\Gamma^2}{(E - E_R)^2 + \Gamma^2/4}. \quad (234)$$

Это так называемая формула Брейта — Вигнера для сечения резонансного рассеяния. Видно, что  $E_R$  определяет положение резонанса, а  $\Gamma$  — ширину

резонанса. Используя тождество  $\exp(-2i \operatorname{arctg} z) = (1 - iz)/(1 + iz)$ , легко получить из уравнения (233), что фаза рассеяния  $\delta_l$  равна

$$\delta_l = \delta_l^{(0)} - \operatorname{arctg} \left[ \frac{\Gamma}{2(E - E_R)} \right].$$

При  $\Gamma \gg E - E_R > 0$  фаза равна  $\delta_l = \delta_l^{(0)} - \pi/2$ , а при  $0 > E - E_R \gg -\Gamma$  фаза равна  $\delta_l = \delta_l^{(0)} + \pi/2$ . Таким образом, при прохождении через резонанс фаза рассеяния меняется на  $\pi$ .

## 19.4. Неупругое рассеяние

Рассеяние частиц может сопровождаться различными неупругими процессами: возбуждением атомных электронов, излучением, захватом, распадом и т. д. Так как плоскую волну можно представить в виде суперпозиции сходящейся и расходящейся сферической волны, то и полная волновая функция также является такой суперпозицией. В случае упругого рассеяния амплитуда сходящейся волны равна амплитуде расходящейся волны, что соответствует закону сохранения числа частиц. В случае неупругого рассеяния амплитуда расходящейся волны меньше амплитуды сходящейся, что соответствует выбыванию частиц. Формулу (230) для амплитуды рассеяния, которая справедлива как в случае упругого, так и в случае неупругого рассеяния, можно представить в виде

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) (S_l - 1) P_l(\cos \theta), \quad S_l = e^{2i\delta_l}. \quad (235)$$

В случае упругого рассеяния фаза  $\delta_l$  является вещественной величиной. В случае неупругого рассеяния  $\delta_l$  является комплексной величиной с положительной мнимой частью, что соответствует условию  $|S_l| < 1$ . В результате сечение упругого рассеяния  $\sigma_{el}$  (отношение потока рассеянных частиц к потоку падающих частиц) равно

$$\sigma_{el} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) |1 - S_l|^2,$$

а сечение неупругого рассеяния  $\sigma_{in}$  (отношение разницы потока сходящихся волн и потока расходящихся волн к падающему току) и полное сечение  $\sigma_{tot} = \sigma_{el} + \sigma_{in}$  равны

$$\sigma_{in} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) (1 - |S_l|^2), \quad \sigma_{tot} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) (1 - \operatorname{Re} S_l).$$



Так как

$$\operatorname{Im} f(0) = \frac{1}{2k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(1 - \operatorname{Re} S_l),$$

то выполняется оптическая теорема

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

В качестве примера рассмотрим случай рассеяния быстрой частицы на идеально поглощающем шаре (чёрном шаре) радиуса  $a$ , считая  $ka \gg 1$ . Характерные моменты  $l$ , дающие вклад в сечение, равны  $l \sim l_0 = ka \gg 1$ . Поэтому можно говорить на языке прицельных параметров  $\rho$ . Естественно считать, что  $S_l = 0$  при  $\rho < a$ , где  $l = k\rho$  и  $S_l = 1$  при  $\rho > a$ . Поэтому

$$\sigma_{tot} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) \approx \frac{2\pi l_0^2}{k^2} = 2\pi a^2.$$

При этом  $\sigma_{el} = \sigma_{in} = \pi a^2$ . Сечение  $\sigma_{el}$  определяется рассеянием на маленькие углы  $\theta \sim 1/(ka)$ , т. е. дифракционным рассеянием. Уравнение на полином Лежандра при больших  $l$  и маленьких  $\theta$  имеет вид

$$\frac{1}{\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \theta \frac{\partial}{\partial \theta} P_l(\cos \theta) + (l + 1/2)^2 P_l(\cos \theta) = 0,$$

которое совпадает с уравнением на функцию Бесселя  $J_0((l+1/2)\theta)$ . Поэтому  $P_l(\cos \theta) \approx J_0(l\theta)$  и амплитуда рассеяния равна

$$f(\theta) = -\frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) J_0(l\theta) \approx \frac{i}{k} \int_{l=0}^{l_0} l J_0(l\theta) dl = \frac{il_0}{k\theta} J_1(l_0\theta) = \frac{ia}{\theta} J_1(ka\theta).$$

Используя табличную формулу  $\int_0^\infty \frac{dz}{z} J_1^2(z) = 1/2$ , находим сечение упругого рассеяния:

$$\sigma_{el} = 2\pi a^2 \int_0^\infty J_1^2(ka\theta) \frac{d\theta}{\theta} = \pi a^2.$$

## РАЗДЕЛ 20. ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Согласно квантовой механике, нельзя провести эксперимент, который позволит отличить один электрон от другого электрона или один протон от другого протона, т. е. существуют тождественные частицы. Обозначим волновую функцию системы  $n$  тождественных частиц за  $\psi(x_1, \sigma_1; x_2, \sigma_2; \dots; x_n, \sigma_n)$ , где  $x_i$  относятся к пространственным переменным, а  $\sigma_i$  относятся к спиновым переменным  $i$ -й частицы. Волновая функция системы  $n$  тождественных частиц при перестановке  $\{x_i, \sigma_i\} \leftrightarrow \{x_j, \sigma_j\}$  переменных любых двух частиц должна переходить сама в себя или со знаком плюс, или со знаком минус. Знаку плюс соответствуют так называемые бозоны, а знаку минус — так называемые фермионы. Существует теорема о связи спина со статистикой, которая говорит, что частицы с целым спином являются бозонами, а с полуцелым спином — фермионами. Таким образом, электроны, протоны, нейтроны — это фермионы, а фотоны, дейтроны, альфа-частицы (ядра  ${}^4\text{He}$ ) — это бозоны. Из антисимметричности волновой функции для фермионов следует принцип Паули: два тождественных фермиона не могут находиться в одной точке с одинаковыми проекциями спинов.

Рассмотрим систему, состоящую из двух невзаимодействующих фермионов со спинами  $1/2$ , имеющих различные ортогональные координатные волновые функции  $\psi_a(x)$  и  $\psi_b(x)$ . Так как спиновая функция с суммарным спином  $S = 1$  является симметричной при перестановке спиновых индексов, а спиновая функция с суммарным спином  $S = 0$  является антисимметричной, то полная волновая функция системы равна

$$\Psi_S(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) \pm \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)] |S, S_z\rangle,$$

где верхний знак отвечает суммарному спину  $S = 0$ , а нижний — суммарному спину  $S = 1$ . Если  $\psi_a = \psi_b$ , то возможно только состояние

$$\Psi(x_1, x_2) = \psi_a(x_1)\psi_a(x_2) |0, 0\rangle.$$

Если  $\psi_a(x) \neq \psi_b(x)$ , то среднее значение потенциальной энергии  $U(|x_1 - x_2|)$  по состоянию  $\Psi_S(x_1, x_2)$  равно

$$\begin{aligned} \bar{U} = & \iint dx_1 dx_2 |\psi_a(x_1)|^2 |\psi_b(x_2)|^2 U(|x_1 - x_2|) \pm \\ & \pm \iint dx_1 dx_2 \psi_a^*(x_1)\psi_b^*(x_2)\psi_a(x_2)\psi_b(x_1) U(|x_1 - x_2|). \end{aligned} \quad (236)$$

Первый вклад — это среднее значение потенциальной энергии для различных частиц, он имеет простую вероятностную интерпретацию. Вторым вкладом

называется обменной энергией и не имеет простой классической интерпретации, он является следствием тождественности частиц. По абсолютной величине оба вклада одного порядка.

Обсудим влияние учёта тождественности на сечение рассеяния двух нерелятивистских фермионов со спинами  $1/2$ . Пусть  $f(\theta)$  — амплитуда рассеяния различимых частиц в системе центра инерции. Процессы рассеяния на угол  $\theta$  и на угол  $\pi - \theta$  являются неразличимыми для тождественных частиц, и, следуя законам квантовой механики, амплитуду рассеяния процесса необходимо записать в виде суперпозиции амплитуд  $f(\theta)$  и  $f(\pi - \theta)$ . Относительный знак в этой суперпозиции зависит от симметрии координатной волновой функции. Если суммарный спин двух фермионов равен  $S = 1$ , то пространственная функция является антисимметричной, и амплитуда рассеяния равна  $f(\theta) - f(\pi - \theta)$ . Если суммарный спин двух фермионов равен  $S = 0$ , то пространственная функция является симметричной, и амплитуда рассеяния равна  $f(\theta) + f(\pi - \theta)$ . Таким образом, дифференциальное сечение рассеяния двух нерелятивистских тождественных фермионов равно

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = W_1 |f(\theta) - f(\pi - \theta)|^2 + W_0 |f(\theta) + f(\pi - \theta)|^2, \quad (237)$$

где  $W_1$  — вероятность иметь суммарный спин  $S = 1$ ,  $W_0$  — вероятность иметь суммарный спин  $S = 0$ . Для неполяризованных пучков, когда все проекции суммарного спина равновероятны,  $W_1 = 3/4$ ,  $W_0 = 1/4$ . Мы видим, что благодаря эффекту тождественности сечение рассеяния нерелятивистского электрона на нерелятивистском электроном отличается от сечения, определяемого формулой Резерфорда (218).

## РАЗДЕЛ 21. ПРИБЛИЖЁННЫЕ МЕТОДЫ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Число задач, которые можно решить точно аналитически, очень ограничено. Поэтому важно использовать приближённые методы вычислений.

### 21.1. Стационарная теория возмущений

Одним из важных приближённых методов является стационарная теория возмущений. Нам необходимо найти собственные функции  $\psi_n(x)$  и собственные значения  $E_n$  гамильтониана  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$  при условии, что мы знаем все собственные функции  $\psi_n^{(0)}(x)$  и соответствующие собственные значения  $E_n^{(0)}$  гамильтониана  $\hat{H}_0$ . Воспользовавшись полнотой совокупности собственных функций гамильтониана  $\hat{H}_0$ , представим  $\psi_n(x)$  в виде

$$\psi_n(x) = \sum_k c_k^{(n)} \psi_k^{(0)}(x), \quad \sum_k |c_k^{(n)}|^2 = 1.$$

Подставив это разложение в уравнение Шредингера  $\hat{H}\psi_n = E\psi_n$ , получим

$$\sum_k (E - E_k^{(0)}) c_k^{(n)} \psi_k^{(0)}(x) = \sum_k c_k^{(n)} \hat{V} \psi_k^{(0)}(x).$$

Умножив обе части этого уравнения на  $\psi_l^{(0)*}(x)$  и взяв интеграл по  $dx$ , получим

$$(E - E_l^{(0)}) c_l^{(n)} = \sum_k V_{lk} c_k^{(n)}, \quad V_{lk} = \int dx \psi_l^{(0)*}(x) \hat{V} \psi_k^{(0)}(x).$$

Полученная система уравнений является точной и представляет собой матричную форму уравнения Шредингера. Хотя эта система является системой алгебраических уравнений, а не дифференциальным уравнением, решать её в общем случае тяжелее, так как число уравнений бесконечно. Однако, эта система очень удобна для построения теории возмущений.

Рассмотрим сначала случай дискретного спектра при отсутствии вырождения и при условии малости возмущения, которое выражается неравенством  $|V_{lk}| \ll |E_l^{(0)} - E_k^{(0)}|$  для  $l \neq k$ . В этом случае матричное уравнение Шредингера можно решать методом итераций. Считая, что  $E \approx E_n^{(0)}$ ,  $c_n^{(n)} \approx 1$  и  $|c_l^{(n)}| \ll 1$  при  $l \neq n$ , получаем

$$c_l^{(n)} = \frac{V_{ln}}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} + \dots, \quad E = E_n^{(0)} + V_{nn} + \sum_{l \neq n} \frac{|V_{ln}|^2}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} + \dots \quad (238)$$

Заметим, что поправка второго порядка к энергии основного состояния всегда отрицательна, так как  $E_0^{(0)} < E_l^{(0)}$ .

Предположим, чт. е. группа близко лежащих уровней, для которых  $|V_{ln}|$  больше или сравнимы с  $|E_n^{(0)} - E_l^{(0)}|$ . В этом случае коэффициенты  $c_l$ , отвечающие этой группе уровней, будут все одного порядка. В главном приближении, оставляя в матричном уравнении только эти коэффициенты, получаем

$$(E - E_l^{(0)}) c_l = \sum_k' V_{lk} c_k,$$

где сумма учитывает только близко лежащие уровни (индекс  $l$  также соответствует этим уровням). Так как мы имеем дело с конечным числом однородных уравнений, то определитель системы должен равняться нулю:

$$\det|V_{lk} - (E - E_l^{(0)}) \delta_{lk}| = 0. \quad (239)$$

Это так называемое секулярное уравнение. Рассмотрим частный случай двух близких уровней. Решая секулярное уравнение, находим

$$E_{1,2} = \frac{1}{2}(V_{11} + E_1^{(0)} + V_{22} + E_2^{(0)}) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(V_{11} + E_1^{(0)} - V_{22} - E_2^{(0)})^2 + |V_{12}|^2}.$$

Если  $E_1^{(0)} = E_2^{(0)}$  и  $V_{11} = V_{22} = 0$ , то  $E_{1,2} = E_1^{(0)} \pm |V_{12}|$ .

Для того чтобы уровни энергии совпадали,  $E_1 = E_2$ , необходимо выполнение двух условий:

$$V_{12} = 0, \quad V_{11} + E_1^{(0)} - V_{22} - E_2^{(0)} = 0.$$

Для выполнения одновременно двух условий необходимо наличие специальных свойств симметрии гамильтониана и возмущения. Поэтому, как правило, вырождение отсутствует.

## 21.2. Силы Ван-дер-Ваальса

Рассмотрим потенциальную энергию взаимодействие  $U(R)$  электрического заряда  $Q$  с нейтральным атомом на расстояниях  $R \gg a_B$ . Статический потенциал  $\varphi(R)$  нейтрального атома на таких расстояния экспоненциально затухает  $\varphi(R) \propto \exp(-R/a_B)$ . Поэтому важным становится эффект поляризуемости атомной оболочки. Для  $r \ll R$  имеем

$$\hat{U} = -\frac{ZeQ}{R} + \sum_i \frac{eQ}{|\mathbf{R} - \mathbf{r}_i|} \approx Q \frac{\mathbf{R} \cdot \hat{\mathbf{D}}}{R^3}, \quad \hat{\mathbf{D}} = \sum_i e \mathbf{r}_i,$$

где  $\hat{\mathbf{D}}$  — оператор дипольного момента атома. Поскольку из-за сохранения чётности среднее значение дипольного момента равно нулю, то потенциальная энергия взаимодействия  $U(R)$  определяется вторым порядком теории

возмущений по оператору  $\hat{U}$  :

$$U(R) = -\frac{\alpha_0 \mathcal{E}^2}{2}, \quad \mathcal{E} = \frac{Q R}{R^3}, \quad \alpha_0 = 2 \sum_{n \neq 0} \frac{|(D_z)_{n0}|^2}{E_n - E_0}, \quad (240)$$

где ось  $z$  направлена вдоль электрического поля. Величина  $\alpha_0$ , входящая в формулу (240), называется поляризуемостью атома. Она имеет размерность объёма и для основного состояния атома водорода имеет порядок  $a_B^3$  (точное значение для основного состояния атома водорода  $\alpha_0 = 9 a_B^3/2$ ). Силы, связанные с поляризуемостью электронных оболочек, называются силами Ван-дер-Ваальса.

Если мы рассмотрим взаимодействие на больших расстояниях  $R$  двух нейтральных атомов, находящихся в основном состоянии, то оператор взаимодействия  $\hat{U}$  будет оператором диполь-дипольного взаимодействия,

$$\hat{U} = \frac{(\hat{\mathbf{D}}_1 \cdot \hat{\mathbf{D}}_2) - 3(\hat{\mathbf{D}}_1 \cdot \mathbf{n})(\hat{\mathbf{D}}_2 \cdot \mathbf{n})}{R^3}, \quad \mathbf{n} = \mathbf{R}/R,$$

где  $\hat{\mathbf{D}}_{1,2}$  — операторы дипольных моментов соответствующих атомов. Поэтому во втором порядке теории возмущений  $U(R) \propto 1/R^6$ .

### 21.3. Приближение Томаса — Ферми

Обсудим очень простой и наглядный метод описания многоэлектронных атомов — метод Томаса — Ферми. Этот метод основан на использовании квазиклассического подхода и приближения самосогласованного поля. Будем считать, что заряд ядра  $Z \gg 1$ . Квазиклассический подход справедлив на расстояниях, на которых находится большинство электронов, т. е.  $a_B \gg r \gg a_B/Z$ . Потенциал  $\varphi(r)$ , с которым взаимодействует каждый электрон, является суммой потенциала ядра и потенциала всех электронов. Он удовлетворяет уравнению Пуассона  $\Delta\varphi = -4\pi\rho(r)$ , где  $\rho(r)$  — плотность электрического заряда. Для  $r > 0$  имеем  $\rho(r) = en(r)$ , где  $n(r)$  — плотность электронов в атоме. Следовательно, потенциальная энергия электрона  $U(r) = e\varphi(r)$  при  $r > 0$  удовлетворяет уравнению

$$\Delta U(r) = -4\pi e^2 n(r).$$

В квазиклассическом приближении число частиц в единице фазового объёма (с учётом спина) равно

$$dN = 2 \frac{d^3r d^3p}{(2\pi\hbar)^3}.$$

Следовательно,

$$n(r) = \frac{2}{(2\pi\hbar)^3} \frac{4}{3} \pi p_{\max}^3,$$

где  $p_{\max}$  определяется из условия того, что электроны имеют энергию  $E \leq 0$ :

$$\frac{p_{\max}^2}{2m} + U(r) = 0.$$

Таким образом, потенциальная энергия  $U(r)$  удовлетворяет уравнению

$$\Delta U(r) = -\frac{4e^2}{3\pi\hbar^3} (-2mU(r))^{3/2}.$$

При  $r \rightarrow 0$  главный вклад в  $U(r)$  даёт потенциал ядра, являющийся сингулярным при  $r \rightarrow 0$ , т. е.  $U(r) \rightarrow -Ze^2/r$ . Сделаем подстановку

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r} \chi(r/r_0), \quad r_0 = b a_B Z^{-1/3}, \quad b = \left( \frac{3\pi}{8\sqrt{2}} \right)^{2/3} \approx 0,885.$$

Тогда функция  $\chi(x)$  удовлетворяет уравнению

$$\sqrt{x} \chi''(x) = \chi^{3/2}(x) \quad (241)$$

с граничными условиями  $\chi(x) \rightarrow 1$  при  $x \rightarrow 0$  и  $\chi(x) \rightarrow 0$  при  $x \gg 1$  (для нейтрального атома). Мы видим, что основное количество электронов находится на расстояниях  $r \sim r_0 \sim a_B Z^{-1/3}$ . Эту зависимость от  $Z$  можно получить, исходя из теоремы о вириале и того, что полное число электронов равно  $Z$ . Пусть характерный импульс электронов в атоме равен  $p_0$  и характерный угловой момент равен  $l_0$ . Тогда

$$\frac{r_0^3 p_0^3}{\hbar^3} \sim Z, \quad \frac{p_0^2}{m} \sim \frac{Ze^2}{r_0},$$

или

$$r_0 \sim a_B Z^{-1/3}, \quad p_0 \sim \frac{\hbar}{a_B} Z^{2/3}, \quad l_0 \sim \frac{r_0 p_0}{\hbar} \sim Z^{1/3}.$$

## 21.4. Вариационный метод

Очень удобным и важным приближённым методом вычисления спектров является вариационный метод. Рассмотрим функционал энергии

$$E = \frac{\int dx \psi^*(x) \hat{H} \psi(x)}{\int dx \psi^*(x) \psi(x)},$$

где  $\psi(x)$  — произвольная комплексная функция. Можно в качестве двух независимых функций рассматривать  $\text{Re} \psi(x)$  и  $\text{Im} \psi(x)$ , но удобнее  $\psi(x)$  и  $\psi^*(x)$ . Вычислим вариацию  $\delta E / \delta \psi^*$ . Имеем

$$\delta E = \frac{\int dx [\delta \psi^*(x)] \hat{H} \psi(x)}{\int dx \psi^*(x) \psi(x)} - \frac{\int dx \psi^*(x) \hat{H} \psi(x)}{[\int dx \psi^*(x) \psi(x)]^2} \int dx [\delta \psi^*(x)] \psi(x). \quad (242)$$

Положив  $\delta E = 0$  и используя определение функционала  $E$ , получаем

$$\int dx [\delta\psi^*(x)](\hat{H} - E)\psi(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad (\hat{H} - E)\psi(x) = 0.$$

Таким образом, экстремум функционала энергии достигается на функциях, удовлетворяющих стационарному уравнению Шредингера.

Вариационный метод состоит в следующем. Рассмотрим некоторую функцию  $\psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n, x)$ , зависящую от  $n$  параметров  $\lambda_i$  и переменной  $x$ . Значение  $E(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$  также будет зависеть от этих параметров. Решая систему уравнений

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_i} E(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = 0,$$

мы найдём значение  $E(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ , которое будет отличаться от собственных значений гамильтониана, но будет к ним достаточно близко расположено. Эта близость зависит как от числа параметров, так и от вида параметризации. Покажем, что вычисленная таким образом вариационная энергия всегда будет больше энергии основного состояния и равна ей только в том случае, если при некоторых значениях параметров вариационная функция совпадёт с волновой функцией основного состояния. Пользуясь полнотой системы собственных функций  $\psi_k(x)$  гамильтониана  $\hat{H}$  и нормируя волновую функцию  $\psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n, x)$  на единицу, запишем эту функцию в виде

$$\psi(\lambda_1, \dots, \lambda_n, x) = \sum_k c_k(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \psi_k(x), \quad \sum_k |c_k(\lambda_1, \dots, \lambda_n)|^2 = 1.$$

Тогда функционал энергии будет равен

$$E(\lambda_1, \dots, \lambda_n) = \sum_k |c_k(\lambda_1, \dots, \lambda_n)|^2 E_k = E_0 + \sum_k |c_k(\lambda_1, \dots, \lambda_n)|^2 (E_k - E_0),$$

где  $E_0$  — энергия основного состояния. Так как  $E_k > E_0$ , то  $E(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \geq E_0$ .

В качестве примера применения вариационного метода рассмотрим основное состояние системы из двух электронов и ядра с зарядом  $Z|e|$ . Гамильтониан равен

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}.$$

Выберем вариационную волновую функцию в виде

$$\psi(Z^*, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_0(Z^*, r_1) \psi_0(Z^*, r_2), \quad \psi_0(Z^*, r) = \frac{(Z^*)^{3/2}}{\sqrt{\pi a_B^3}} \exp[-r Z^*/a_B].$$

Здесь  $Z^*$  — вариационный параметр. При  $Z^* = Z$  функция  $\psi_0(Z, r)$  совпадает с волновой функцией основного состояния одного электрона в поле ядра с



зарядом  $Z|e|$ . Воспользовавшись теоремой о вириале, симметрией волновой функции и производящей функцией для полиномов Лежандра, получаем

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2m} \right\rangle &= \left\langle \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2m} \right\rangle = \frac{e^2}{2a_B} Z^{*2}, & \left\langle \frac{e^2}{r_1} \right\rangle &= \left\langle \frac{e^2}{r_2} \right\rangle = \frac{e^2}{a_B} Z^*, \\ \left\langle \frac{e_1^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right\rangle &= \frac{e^2}{a_B} \frac{5}{8} Z^*. \end{aligned} \quad (243)$$

В результате для  $E(Z^*)$  находим

$$E(Z^*) = \frac{e^2}{a_B} \left[ Z^{*2} - 2Z Z^* + \frac{5}{8} Z^* \right].$$

Минимум энергии получается при  $Z^* = Z - 5/16$ , он равен

$$E = -2 \left( Z - \frac{5}{16} \right)^2 \text{Ry}, \quad \text{Ry} = \frac{e^2}{2a_B}.$$

Для  $Z = 2$  (гелий) получаем  $E = -5,695 \text{Ry}$ , а точное значение равно  $E = -5,808 \text{Ry}$ . Для  $Z = 1$  (ион  $\text{H}^-$ ) получаем  $E = -2(11/16)^2 \text{Ry} > -\text{Ry}$ . Можно было бы подумать, что стабильного иона  $\text{H}^-$  не существует. Однако в этом случае использованная параметризация волновой функции является не достаточно точной. Можно написать вариационную волновую функцию, зависящую от двух параметров, для которой выполняется соотношение  $E < -\text{Ry}$ , что говорит о том, что ион  $\text{H}^-$  является стабильным.

## РАЗДЕЛ 22. СПЕКТРЫ АТОМА ВОДОРОДА И МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ АТОМОВ

Рассмотрим сначала атом водорода. Здесь используются следующие обозначения для состояния с определёнными квантовыми числами:

$$n L_J,$$

где  $n$  — главное квантовое число,  $L$  — орбитальный момент и  $J = L \pm 1/2$  — полный угловой момент. Например,  $2s_{1/2}$  обозначает состояние с  $n = 2$ ,  $L = 0$  и  $J = 1/2$ ;  $2p_{3/2}$  обозначает состояние с  $n = 2$ ,  $L = 1$  и  $J = 3/2$ . Буква  $s$  соответствует орбитальному моменту  $L = 0$ ,  $p$  — орбитальному моменту  $L = 1$ ,  $d$  — орбитальному моменту  $L = 2$ ,  $f$  — орбитальному моменту  $L = 3$ .

Как уже говорилось, в атоме водорода формула для энергии  $E$ , учитывающая тонкую структуру, даёт одинаковые значения для данных  $n$  и  $J$  при  $L = J + 1/2$  и  $L = J - 1/2$  (например, уровень  $2s_{1/2}$  имеет ту же энергию, что и уровень  $2p_{1/2}$ ). Кроме того, для данного  $n$  состояние с большим  $J$  будет иметь большую энергию (например, уровень  $2p_{3/2}$  находится выше уровня  $2p_{1/2}$ ).

Перейдём теперь к многоэлектронным атомам. Если  $k$  электронов находятся в состоянии с данными  $n$  и  $l$ , то это записывается так  $n l^k$ . О распределении электронов в атоме по состояниям с разными  $n$  и  $l$  говорят, как об электронной конфигурации. Электроны с данными  $n$  и  $l$  могут иметь различные проекции орбитального момента  $l_z$  ( $-l \leq l_z \leq l$ ) и спина  $s_z$  ( $s_z = \pm 1/2$ ). Согласно принципу Паули, в каждом состоянии может находиться только один электрон. Совокупность всех  $2(2l+1)$  состояний при данных  $n$  и  $l$  называется оболочкой. Если все состояния в оболочке заняты, то говорят о заполненной оболочке.

При рассмотрении модели Томаса — Ферми мы говорили о самосогласованном потенциале  $U(r)$ , в котором движутся все электроны. В этом потенциале можно найти одноэлектронные уровни энергии, определяемые главным квантовым числом  $n$  и орбитальным моментом  $l$ . Потенциал  $U(r)$  является приближённым способом описания состояния электронов в атоме. Существуют разные методы его вычисления и метод Томаса — Ферми — один из них. Разность между точным потенциалом и самосогласованным потенциалом называется остаточным взаимодействием.

Гамильтониан многоэлектронного атома состоит из следующих вкладов: нерелятивистская кинетическая энергия всех электронов, самосогласованный потенциал, остаточное взаимодействие и релятивистские поправки. Рассмотрим некоторое количество электронов на незаполненной оболочке (не все состояния в оболочке с данным  $n$  и  $l$  заняты). Тогда из волновых функций электронов на этой оболочке можно (при учёте принципа Паули) построить состояние с полным орбитальным моментом электронов  $L$  ( $\hat{L} = \sum \hat{l}_i$ ) и полным спином  $S$  ( $\hat{S} = \sum \hat{s}_i$ ). Если пренебречь остаточным взаимодействием

и релятивистскими эффектами, то все эти состояния будут иметь одинаковую энергию, не зависящую от  $L$  и  $S$ . С учётом остаточного взаимодействия вырождение снимается, и состояния с разными  $L$  и  $S$  будут иметь разную энергию из-за разной симметрии волновых функций (обменное взаимодействие). Соответствующее расщепление не является релятивистской поправкой. Оно имеет порядок ридберга, умноженного на некоторый численный коэффициент. Для того, чтобы определить состояние с наименьшей энергией в оболочке, существуют три феноменологических правила Хунда.

1. Среди разрешённых по принципу Паули состояний надо найти состояние с наибольшим спином  $S$ .

Это правило можно интерпретировать следующим образом. Рассмотрим систему из двух  $p$  электронов ( $l = 1$ ). Если суммарный спин равен единице ( $S = 1$ ), то спиновая функция будет симметричной, а координатная функция будет антисимметричной, т. е. электроны не смогут находиться близко друг от друга, и кулоновское отталкивание уменьшается. Если спин равен нулю ( $S = 0$ ), то спиновая функция будет антисимметричной, а координатная функция будет симметричной, т. е. электроны смогут находиться близко друг от друга, и кулоновское отталкивание увеличивается. Если складываются два момента  $l = 1$ , то угловая функция с  $L = 0$  и  $L = 2$  будет симметричной, а с  $L = 1$  будет антисимметричной. Для обозначения конфигурации оболочки используется следующее обозначение:

$$^{2S+1}L.$$

Таким образом, для двух  $p$  электронов имеем конфигурации  $^3P$ ,  $^1D$  и  $^1S$ . Состояние с наибольшим спином ( $S = 1$ ) одно ( $^3P$ ) — это и есть состояние с наименьшей энергией. Выше находится состояние  $^1D$ , а ещё выше  $^1S$ . Можно сказать, что состояние с максимальным спином при любом числе электронов будет обладать максимальной антисимметрией, т. е. минимальным кулоновским отталкиванием.

2. Если состояний с максимальным спином  $S$  несколько, то наименьшей энергией при данном  $S$  будет обладать состояние с максимальным моментом  $L$ . Этот факт является чисто геометрическим: чем больше  $L$ , тем больше среднее расстояние между электронами. После того, как мы нашли  $S$  и  $L$ , согласно правилам Хунда 1 и 2, полный момент  $J$  может принимать разные значения  $|L - S| \leq J \leq L + S$ . Здесь в дело вступает третье правило Хунда.
3. Если оболочка заполнена менее чем наполовину, то состояние с наименьшей энергией будет обладать наименьшим полным моментом  $J$ , а если оболочка заполнена более чем наполовину, то состояние с наименьшей энергией будет обладать наибольшим  $J$ .

Третье правило Хунда связано с учётом спин-орбитального взаимодействия. Когда электронов мало, то можно рассмотреть спектр водорода с одним электроном в кулоновском поле: там состояние с минимальным  $J$  имеет наименьшую энергию. Если оболочка заполнена более чем наполовину, то можно провести следующее рассуждение. Если оболочка полностью заполнена, то  $L = 0$  и  $S = 0$ . Оболочка с большим количеством электронов эквивалентна оболочке с маленьким количеством дырок. Заряд у дырки противоположен заряду электрона. Поэтому знак спин-орбитального взаимодействия для дырок противоположен знаку спин-орбитального взаимодействия для электронов. Поэтому для дырок состояние с наименьшей энергией будет обладать наибольшим моментом  $J$ . Если оболочка заполнена ровно наполовину, то поправка первого порядка по спин-орбитальному взаимодействию обращается в ноль, и никакого правила нет. Используются следующие обозначения электронной конфигурации оболочки, учитывающие полный момент  $J$ :

$$^{2S+1}L_J.$$

Для рассмотренного нами случая двух  $p$  электронов имеем следующие термы (в порядке возрастания энергии):

$$^3P_0, ^3P_1, ^3P_2, ^1D_2, ^1S_0. \quad (244)$$

Рассмотрим теперь задачу о трёх  $p$  электронах. Каждое состояние электрона можно характеризовать двумя числами ( $s_z, l_z$ ). У нас есть шесть ячеек (три с  $s_z = 1/2$  и три с  $s_z = -1/2$ ). Мы должны разместить три частицы по шести ячейкам (по одной в каждую). То есть у нас 20 вариантов. Для того, чтобы узнать, какие есть термы в системе трёх  $p$  электронов, достаточно пересчитать количество состояний с неотрицательной суммарной проекцией спина и неотрицательной суммарной проекцией орбитального момента. Если все три частицы посадить в состояния с  $s_z = 1/2$ , то  $S_z = 3/2$  и  $L_z = 0$ . Полный спин  $S$  равен максимальной проекции  $S_z$ . Таким образом, у нас есть терм  $^4S$  (не путайте обозначение спина с буквой в терме, обозначающей орбитальный момент!). Есть шесть состояний, которые имеют две частицы с проекцией спина  $s_z = 1/2$  и одну частицу с  $s_z = -1/2$ , из них одно состояние имеет  $L_z = 2$ , два  $L_z = 1$  и три  $L_z = 0$ . Остальные состояния имеют или отрицательные  $S_z$ , или отрицательные  $L_z$ . Таким образом, у нас есть терм  $^2D$  ( $L = 2$  и  $S = 1/2$ ). Одна линейная комбинация состояний с  $L_z = 1$  и  $S_z = 1/2$  отвечает состоянию из терма  $^2D$ . Следовательно, вторая линейная комбинация отвечает терму  $^2P$ . Три линейные комбинации состояний с  $L_z = 0$  и  $S_z = 1/2$  отвечают термам

$$^4S, ^2D, ^2P,$$

каждый из которых имеет, соответственно,  $4 \times 1 = 4$ ,  $2 \times 5 = 10$  и  $2 \times 3 = 6$  компонент, всего 20 компонент. Таким образом, метод ячеек не говорит о том,

какая конкретно комбинация состояний с определёнными  $s_z$  и  $l_z$  является состоянием с определёнными  $S_z$  и  $L_z$ , но позволяет определить, какие термы существуют. Следуя правилам Хунда, мы находим, что состоянием с наиминимшей энергией является терм  ${}^4S$ , который, очевидно, имеет  $J = 3/2$  так как  $L = 0$ .

Рассмотрим теперь случай четырёх  $p$  электронов. Так как  $p$  оболочка вмещает в себя шесть электронов, то четыре  $p$  электрона эквивалентны двум дыркам. С учётом третьего правила Хунда, термы (в порядке возрастания энергии) для четырёх  $p$  электронов следующие

$${}^3P_2, {}^3P_1, {}^3P_0, {}^1D_2, {}^1S_0.$$

Приведённые выше правила для нахождения состояния незаполненной оболочки с наиминимшей энергией применимы для не очень тяжёлых атомов. В них сначала (с учётом принципа Паули) находятся состояния с полным спином  $S$ , потом с полным моментом  $L$ , а потом с полным  $J$ . Это так называемая  $LS$  связь. Такой подход справедлив в случае, когда остаточное взаимодействие значительно больше релятивистских поправок.

В очень тяжёлых атомах остаточное взаимодействие может быть значительно меньше релятивистских поправок. В этом случае используется другой подход — так называемая  $jj$  связь. В этом подходе сначала для каждого электрона строятся состояния с определённым  $j = l \pm 1/2$ , а потом (с учётом принципа Паули) строятся состояния с полным моментом  $J$ . Рассмотрим два  $p$  электрона. Имеем два состояния (с учётом проекции  $J_z$ )  $p_{1/2}$  и четыре состояния  $p_{3/2}$ . Как мы знаем, состояние  $p_{1/2}$  имеет энергию ниже, чем  $p_{3/2}$ . Значит, у нас есть две подоболочки, соответствующие этим квантовым числам. Если мы посадим два электрона в состояние  $p_{1/2}$  (что соответствует состоянию с наиминимшей энергией), то подоболочка будет заполнена, и её полный момент будет равен  $J = 0$ . Если мы посадим один электрон в состояние  $p_{1/2}$ , а другой электрон в состояние  $p_{3/2}$ , то их состояния будут разными и полный момент может быть как  $J = 2$ , так и  $J = 1$ . Заметим, что без учёта остаточного взаимодействия, энергии этих состояний будут равны. Учёт остаточного взаимодействия снимает это вырождение, причём состояние с  $J = 2$  будет выше, чем состояние с  $J = 1$ .

Теперь посадим два электрона в состояние  $p_{3/2}$ . При сложении двух спинов  $3/2$  полный спин может быть 3, 2, 1, 0. Но волновые функции со спином 3 и 1 будут симметричными, а со спином 2 и 0 будут антисимметричными. Поэтому, с учётом принципа Паули, полный момент  $J$  двух электронов в состоянии  $p_{3/2}$  может быть равен  $J = 2$  и  $J = 0$ . Как и раньше, учёт остаточного взаимодействия снимает вырождение между этими уровнями, причём состояние с  $J = 0$  будет выше, чем состояние с  $J = 2$ . Заметим, что полученная нами в подходе  $jj$  связи последовательность уровней энергии по  $J$  совпадает с последовательностью в (244).

Рассмотрим теперь последовательность заполнения атомных оболочек. В кулоновском поле энергия уровня зависит в нерелятивистском приближении только от главного квантового числа  $n = n_r + l + 1$ . В многоэлектронном атоме самосогласованный потенциал не является кулоновским, и энергия зависит и от  $n$ , и от  $l$ . Это обстоятельство влияет на порядок заполнения оболочек. Сначала заполняется оболочка  $1s$ . Затем, в порядке возрастания энергии,  $2s$ ,  $2p$  и  $3s$ ,  $3p$ . После этого порядок заполнения меняется. Дело в том, что состояние  $3d$  за счёт орбитального момента находится выше, чем  $4s$ , но ниже, чем  $4p$ . Поэтому после  $3p$  заполняется  $4s$ ,  $3d$ ,  $4p$ . Дальше история повторяется, в порядке повышения энергии имеем оболочки  $5s$ ,  $4d$  и  $5p$ , затем  $6s$ ,  $4f$ ,  $5d$ ,  $6p$  и т. д.

## РАЗДЕЛ 23. СВЕРХТОНКАЯ СТРУКТУРА

Сверхтонкая структура атомных спектров определяется взаимодействием магнитного поля, создаваемого магнитным моментом ядра  $\boldsymbol{\mu}_N$ , с атомными электронами. Есть также вклад, обусловленный взаимодействием электрического поля, создаваемого квадрупольным моментом ядра  $Q_{ij}$ , с атомными электронами. Последний вклад, как правило, значительно меньше вклада магнитного момента, и мы его рассматривать не будем.

Магнитный момент ядра создаёт вектор-потенциал  $\mathbf{A}$  и магнитное поле  $\mathcal{H}$ :

$$\mathbf{A} = \frac{\boldsymbol{\mu}_N \times \mathbf{r}}{r^3}, \quad \mathcal{H} = \frac{3\mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mu}_N) - \boldsymbol{\mu}_N}{r^3} + \frac{8\pi}{3}\delta(\mathbf{r})\boldsymbol{\mu}_N.$$

В линейном по магнитному моменту приближении гамильтониан  $\delta\hat{H}$  взаимодействия электрона с магнитным полем имеет вид

$$\begin{aligned} \delta\hat{H} &= -\frac{e}{2m_e c}(\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} + \hbar\boldsymbol{\sigma}_e \cdot \mathcal{H}) = \\ &= -\frac{e\hbar}{2m_e c} \left[ \frac{2\hat{\mathbf{l}} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_N}{r^3} + \frac{3(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_e)(\mathbf{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_N) - (\boldsymbol{\sigma}_e \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}_N)}{r^3} + \frac{8\pi}{3}\delta(\mathbf{r})(\hat{\boldsymbol{\mu}}_N \cdot \boldsymbol{\sigma}_e) \right]. \end{aligned}$$

Первые два члена ( $\propto 1/r^3$ ) дают вклад в поправку к энергии только тогда, когда  $l \neq 0$ , а третий член ( $\propto \delta(\mathbf{r})$ ) даёт вклад в поправку к энергии только для  $l = 0$ . Для атома водорода в состоянии  $1s_{1/2}$  поправка к энергии равна

$$\begin{aligned} \delta E &= -\frac{e\hbar}{2m_e c} \frac{8\pi}{3} \psi^2(0) \left( -2,79 \frac{e\hbar}{2m_p c} \right) (\boldsymbol{\sigma}_p \cdot \boldsymbol{\sigma}_e) = \\ &= 2,79 \frac{8}{3} \alpha^2 \frac{m_e}{m_p} (F(F+1) - 3/2) \text{Ry}, \end{aligned} \quad (245)$$

где  $F = 1, 0$  — полный спин электрона и протона. Разница энергий

$$\delta E(F=1) - \delta E(F=0) = 2,79 \frac{16}{3} \alpha^2 \frac{m_e}{m_p} \text{Ry}$$

отвечает длине волны света 21 см. Поправку  $\delta E$  можно оценить как

$$\delta E \sim \frac{\mu_e \mu_p}{a_B^3}.$$

Поскольку тонкая структура, как релятивистская поправка, имеет порядок  $(v^2/c^2)\text{Ry} \sim \alpha^2\text{Ry}$ , то отношение сверхтонкой структуры к тонкой структуре имеет порядок  $m_e/m_p$ .

Рассмотрим теперь многоэлектронный атом. За счёт сверхтонкого взаимодействия с гамильтонианом коммутирует не полный момент электрона  $\hat{\mathbf{J}}$

и спин ядра  $\hat{\mathbf{i}}$  по отдельности, а полный момент  $\hat{\mathbf{F}} = \hat{\mathbf{J}} + \hat{\mathbf{i}}$ . После усреднения по электронной волновой функции, поправка к энергии имеет вид

$$\delta E = b \langle \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{i}} \rangle = \frac{b}{2} \left( F(F+1) - J(J+1) - i(i+1) \right),$$

где  $b \sim \alpha^2 \frac{m_e}{m_p} \text{Ry}$ . Обсудим теперь вопрос о том, как  $b$  зависит от  $Z$  в случае одного электрона поверх заполненных оболочек в случае больших  $Z$ . Наивно может казаться, что внутренние  $Z - 1$  электроны экранируют ядро до заряда порядка единицы, и для внешнего электрона всё будет так же, как в водороде. В самом деле, энергия внешнего электрона будет порядка  $\text{Ry}$ , размер волновой функции будет порядка  $a_B$ . Однако, сверхтонкое расщепление будет усилено в  $Z$  раз по сравнению с водородом. Докажем это утверждение. Вероятность найти электрон на расстоянии от ядра  $r \sim a_B/Z$ , где экранировка не работает, можно оценить как  $\psi^2(r)r^3$ . Оператор сверхтонкого взаимодействия пропорционален  $1/r^3$ . Таким образом, поправка к энергии  $\delta E \propto \psi^2(r)$ . На расстояниях  $r \sim a_B/Z$  потенциальная энергия

$$|U| \sim Ze^2/r \sim Z^2 e^2/a_B \sim Z^2 \text{Ry} \gg E.$$

Поэтому справедливо квазиклассическое приближение. Квазиклассическая волновая функция в трёхмерной задаче имеет вид

$$\psi(r) \sim \frac{e^{\pm i \int^r p(r') dr'}}{r \sqrt{p(r)}}, \quad p(r) = \sqrt{2m(E - U)} \approx \sqrt{2m(-U)} \sim Z \sqrt{m \text{Ry}}.$$

Таким образом,

$$\psi^2(r) \propto \frac{1}{r^2 p(r)} \propto \frac{Z^2}{Z} = Z, \quad \psi^2(a_B/Z) \sim \frac{Z}{a_B^3},$$

т. е.  $\psi^2(r)$  на малых расстояниях усилена в  $Z$  раз по сравнению с водородом, также как и сверхтонкое расщепление.

**Задача 23.1.** Покажите, что при  $Z \gg 1$  в случае одного электрона поверх заполненных оболочек тонкая структура усилена в  $Z^2$  раз по сравнению с водородом.

**Задача 23.2.** Найдите сверхтонкое расщепление для атома водорода с электроном в состоянии с  $l \neq 0$ .

Указания:

а) оператор взаимодействия при  $l \neq 0$  равен

$$\delta \hat{H} = 2,79 \left( \frac{e^2 \hbar^2}{4m_e m_p c^2} \right) \frac{1}{r^3} \left[ 2\hat{\mathbf{l}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_p + 3(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_e)(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}_p) - (\boldsymbol{\sigma}_e \cdot \boldsymbol{\sigma}_p) \right]; \quad (246)$$



б) используя векторную теорему, покажите, что

$$\langle 3n^i n^j - \delta^{ij} \rangle = -\frac{3}{(2l+3)(2l-1)} \langle \hat{l}^i \hat{l}^j + \hat{l}^j \hat{l}^i - \frac{2}{3} l(l+1) \delta^{ij} \rangle;$$

в) используя векторную теорему и п. б), покажите, что

$$\langle 2\hat{l} \cdot \sigma_p + 3(\mathbf{n} \cdot \sigma_e)(\mathbf{n} \cdot \sigma_p) - (\sigma_e \cdot \sigma_p) \rangle = \frac{2l(l+1)}{J(J+1)} \langle \sigma_p \cdot \hat{J} \rangle. \quad (247)$$

## РАЗДЕЛ 24. ИЗОТОПИЧЕСКИЙ СДВИГ

Изотопами называются ядра, имеющие одинаковое количество протонов  $Z$  и разное количество нейтронов  $N$  (атомный номер  $A = Z + N$ ,  $A \approx 2Z$ ). Разница соответствующих уровней энергий электронов в двух изотопах называется изотопическим сдвигом. Существует два эффекта, приводящие к изотопическому сдвигу: эффект конечной массы ядра и эффект конечного размера ядра (объёмный эффект). Для того чтобы учесть конечную массу ядра, достаточно в первом приближении добавить к гамильтониану кинетическую энергию ядра

$$T = \frac{\hat{P}^2}{2M}, \quad \hat{P} = - \sum_i \hat{p}_i,$$

где  $\hat{P}$  — импульс ядра, а  $\hat{p}_i$  — импульсы электронов. Поэтому смещение уровня за счёт конечной массы ядра можно оценить как

$$E_M \sim \frac{m_e}{M} \text{Ry} = \frac{m_e}{Am_p} \text{Ry}.$$

Отсюда изотопический сдвиг (за счёт разницы атомного числа  $\delta A$ ) равен

$$\delta E_M \sim - \frac{\delta A m_e}{A^2 m_p} \text{Ry}.$$

Рассмотрим теперь объёмный эффект. Электрическое поле ядра отличается от кулоновского на расстояниях меньше размера ядра. Поэтому объёмный эффект наиболее заметен для состояний с орбитальным моментом  $l = 0$ . Смещение уровня за счёт конечного радиуса ядра можно оценить как

$$E_R \sim \int \psi^2(r) \delta U(r) d^3r \sim \psi^2(0) \frac{Ze^2}{R} R^3.$$

Здесь  $\delta U(r)$  — разница между потенциальной энергией электрона для ядра конечного радиуса  $R$  и кулоновской потенциальной энергией,  $\delta U(r) > 0$ . Радиус ядра равен  $R = R_0 A^{1/3}$ , где  $R_0 = 1,2 \text{ Фм}$ ,  $1 \text{ Фм} = 10^{-13} \text{ см}$ . Как было показано при обсуждении тонкой структуры,  $\psi^2(0) \sim Z/a_B^3$ . Таким образом,

$$E_R \sim Z^2 A^{2/3} \left( \frac{R_0}{a_B} \right)^2 \text{Ry}.$$

Отсюда изотопический сдвиг (за счёт разницы атомного числа  $\delta A$ ) равен

$$\delta E_R \sim Z^2 \delta A A^{-1/3} \left( \frac{R_0}{a_B} \right)^2 \text{Ry} \sim \delta A A^{5/3} \left( \frac{R_0}{a_B} \right)^2.$$

Отношение  $\delta E_R/\delta E_M$  равно

$$\delta E_R/\delta E_M \sim -A^{11/3} \left( \frac{R_0}{a_B} \right)^2 \frac{m_p}{m_e} \sim -A^{11/3} 10^{-6}.$$

Это отношение становится больше единицы для  $Z > 44$ .

## РАЗДЕЛ 25. АТОМ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ (ЭФФЕКТ ШТАРКА)

Оператор взаимодействия электронов с однородным электрическим полем  $\mathcal{E}$  равен

$$V = -\mathcal{E} \cdot \hat{\mathbf{d}}, \quad \hat{\mathbf{d}} = \sum_i e r_i.$$

Точного вырождения между разными термами, как правило, не существует. Всегда есть какой-то эффект, который снимает вырождение. Из-за сферической симметрии кулоновского поля ядра, каждый терм обладает определённой чётностью относительно преобразования  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ . Квадрат волновой функции  $\psi^2$  не меняется при преобразовании  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ . Поэтому  $\langle \hat{\mathbf{d}} \rangle = 0$ , т. е. в первом порядке теории возмущений по  $\mathcal{E}$  поправка к энергии отсутствует и надо использовать второй порядок теории возмущений:

$$\delta E_n = \sum_{k \neq n} \frac{\langle n | \hat{d}^i | k \rangle \langle k | \hat{d}^j | n \rangle \mathcal{E}^i \mathcal{E}^j}{E_n - E_k} = -\frac{1}{2} \alpha_{ij}^{(n)} \mathcal{E}^i \mathcal{E}^j, \quad (248)$$

где  $\alpha_{ij}^{(n)}$  называется тензором электрической поляризуемости атома. Эта формула справедлива тогда, когда  $|\langle n | \hat{\mathbf{d}} \cdot \mathcal{E} | k \rangle| \ll |E_n - E_k|$ . Поскольку  $\mathcal{E}^2$  имеет размерность плотности энергии, то поляризуемость имеет размерность объёма. Если расстояние до ближайшего уровня порядка  $R_y$ , то  $\alpha_{ij}^{(n)} \sim a_B^3$  и  $\mathcal{E} \ll \mathcal{E}_0$ , где  $\mathcal{E}_0 = |e|/a_B^2 = 5,4 \cdot 10^9$  В/см. Если речь идёт об интервале тонкой структуры, где расстояние до ближайшего уровня порядка  $\alpha^2 R_y \sim 10^{-5} R_y$ , то  $\alpha_{ij}^{(n)} \sim a_B^3/\alpha^2$  и  $\mathcal{E} \ll \alpha^2 \mathcal{E}_0 = 3 \cdot 10^5$  В/см.

Если речь идёт об интервале тонкой структуры и  $\mathcal{E} \sim \alpha^2 \mathcal{E}_0$ , то надо писать секулярное уравнение. Рассмотрим случай, когда есть всего два близких уровня противоположной чётности с волновыми функциями  $\psi_1$  и  $\psi_2$ . Выберем направление электрического поля за ось  $z$ . Так как существует инвариантность относительно поворотов вокруг оси  $z$ , то сохраняется проекция полного момента  $J_z$ . Собственная функция гамильтониана с учётом электрического поля будет иметь вид  $\Psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$ , где  $c_{1,2}$  удовлетворяет системе уравнений

$$\begin{aligned} (E_1 - E)c_1 + V_{12}c_2 &= 0, \\ V_{21}c_1 + (E_2 - E)c_2 &= 0, \\ V_{12} = V_{21}^* &= \mathcal{E} \int \psi_1^+ z \psi_2 d^3 r. \end{aligned} \quad (249)$$

Приравнивая к нулю определитель однородной системы уравнений, находим уровни энергии:

$$E = \frac{1}{2} \left[ E_1 + E_2 \pm \sqrt{(E_1 - E_2)^2 + 4|V_{12}|^2} \right].$$

Подставляя эти уровни энергии в систему уравнений, находим коэффициенты  $c_{1,2}$ . При  $|V_{12}| \gg |E_1 - E_2|$  расщепление уровней будет линейным по электрическому полю и  $|c_1| = |c_2| = 1/\sqrt{2}$ . Если фазы волновых функций выбрать так, чтобы матричный элемент  $V_{12}$  был вещественным, то при  $|V_{12}| \gg |E_1 - E_2|$  будет  $c_1 = \pm c_2$ .

## РАЗДЕЛ 26. АТОМ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Как уже говорилось при обсуждении сверхтонкой структуры, взаимодействие магнитного поля с электроном в линейном по магнитному полю приближении описывается гамильтонианом

$$\delta\hat{H}_1 = -\frac{e}{2m_e c}(\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} + \hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathcal{H}) = -\frac{e\hbar}{2m_e c}(\hat{\mathbf{l}} + 2\hat{\mathbf{s}}) \cdot \mathcal{H}, \quad (250)$$

где для однородного магнитного поля мы использовали представление  $\mathbf{A}$  в виде

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathcal{H} \times \mathbf{r}].$$

Для многоэлектронного атома

$$\delta\hat{H}_1 = -\frac{e\hbar}{2m_e c}(\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \cdot \mathcal{H}, \quad (251)$$

где  $\hat{\mathbf{L}} = \sum_i \hat{\mathbf{l}}_i$  — оператор полного орбитального момента электронов атома, а  $\hat{\mathbf{S}} = \sum_i \hat{\mathbf{s}}_i$  — оператор полного спина электронов атома.

Если  $\mu_B \mathcal{H} \gg \alpha^2 R_y$  (интервал тонкой структуры), т. е.

$$\mathcal{H} \gg \mathcal{H}_0 = \alpha \frac{|e|}{a_B^2} = 1,25 \cdot 10^5 \text{ Гс},$$

то тонкой структурой можно пренебречь и будет отдельно сохраняться  $L_z$  и  $S_z$ , где за ось  $z$  выбрано направление магнитного поля. В результате поправка к энергии будет равна

$$\delta E = -\frac{e\hbar}{2m_e c}(L_z + 2S_z)\mathcal{H}. \quad (252)$$

Это так называемый нормальный эффект Зеемана.

В слабом поле  $\mathcal{H} \ll \mathcal{H}_0$  оператор взаимодействия с магнитным полем надо усреднить по состоянию с определённым  $L, S, J$ . Воспользовавшись векторной теоремой, находим

$$\begin{aligned} \delta E &= -\frac{e\hbar}{2m_e c} g \mathcal{H} J_z, \\ g &= 1 + \frac{\langle \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{J}} \rangle}{J(J+1)} = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \end{aligned} \quad (253)$$

Множитель  $g$  называется фактором Ланде, а сдвиг энергии в слабом магнитном поле называется аномальным эффектом Зеемана. Когда  $\mathcal{H} \sim \mathcal{H}_0$ , то взаимодействие с магнитным полем надо учитывать одновременно с тонкой структурой, т. е. писать секулярное уравнение. В результате поправка к

энергии перестаёт зависеть линейно от магнитного поля. Это так называемый эффект Пашена — Бака.

Если  $L = S = J = 0$ , то работает квадратичный по полю член в гамильтониане

$$\delta\hat{H}_2 = \frac{e^2}{2m_e c^2} \mathbf{A}^2 = \frac{e^2}{8m_e c^2} [\mathbf{r} \times \boldsymbol{\mathcal{H}}]^2.$$

Соответствующая поправка к энергии положительна и квадратична по полю (диамагнетизм):

$$\delta E = \frac{e^2 \mathcal{H}^2}{12m_e c^2} \left\langle \sum_a r_a^2 \right\rangle.$$

Если  $L = S \neq 0$ , но  $J = 0$ , то работает поправка второго порядка по  $\delta\hat{H}_1$ , где основной вклад даёт сумма по интервалам тонкой структуры. В результате поправка к энергии основного состояния будет отрицательна и квадратична по полю (парамагнетизм).

## РАЗДЕЛ 27. НЕСТАЦИОНАРНАЯ ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

Рассмотрим гамильтониан вида

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(x, t),$$

где зависящее от времени возмущение  $\hat{V}(x, t)$  может обладать следующими свойствами:

1.  $\hat{V}(x, t) \rightarrow 0$  при  $t \rightarrow \pm\infty$ ;
2.  $\hat{V}(x, t) \rightarrow 0$  при  $t \rightarrow -\infty$  и  $\hat{V}(x, t) \rightarrow U(x) \neq 0$  при  $t \rightarrow +\infty$ ;
3.  $\hat{V}(x, t)$  мгновенно включается, но не выключается (внезапное возмущение);
4.  $\hat{V}(x, t)$  очень медленно включается и выключается (адиабатическое возмущение);
5.  $\hat{V}(x, t)$  очень медленно включается, но не выключается (адиабатическое возмущение);
6.  $\hat{V}(x, t)$  является периодической функцией времени.

Далее будем предполагать, что мы знаем все собственные функции  $\psi_k(x)$  и соответствующие энергии  $E_k$  невозмущённого гамильтониана  $\hat{H}_0$ .

### 27.1. Случай возмущения $\hat{V}(x, t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \pm\infty$

Пусть при  $t \rightarrow -\infty$  частица находилась в состоянии  $\psi_k(x)$ . Надо найти вероятность того, что при  $t \rightarrow +\infty$  частица будет находиться в состоянии  $\psi_n(x)$ . Воспользовавшись полнотой собственных функций гамильтониана  $\hat{H}_0$ , запишем решение  $\Psi(x, t)$  уравнения Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = [\hat{H}_0 + \hat{V}(x, t)] \Psi(x, t)$$

в виде

$$\Psi(x, t) = \sum_m e^{-iE_m t/\hbar} a_m(t) \psi_m(x). \quad (254)$$

Подставим это представление в уравнение Шредингера, умножим слева на  $\psi_n^*(x)$  и проинтегрируем по  $dx$ , воспользовавшись ортогональностью волновых функций. В результате получим

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{a}_n &= \sum_m V_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t} a_m, \\ \omega_{nm} &= \frac{1}{\hbar}(E_n - E_m), \quad V_{nm}(t) = \int \psi_n^*(x) \hat{V}(x, t) \psi_m(x) dx. \end{aligned} \quad (255)$$



В первом порядке теории возмущений достаточно в сумме по  $m$  оставить одно слагаемое с  $m = k$ , поскольку  $a_k \approx 1$  и  $|a_m| \ll 1$  при  $m \neq k$ . После этого имеем

$$a_n(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t V_{nk}(t') e^{i\omega_{nk}t'} dt'. \quad (256)$$

Поэтому вероятность перехода  $W_{nk}$  из состояния с номером  $k$  в состояние с номером  $n$  равна

$$W_{nk} = |a_n(\infty)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{nk}(t) e^{i\omega_{nk}t} dt \right|^2. \quad (257)$$

Для пояснения содержания этой формулы рассмотрим следующий пример. Пусть  $V(x, t) = U(x) \exp(-|t|/\tau)$ . Тогда для вероятности перехода находим (проверьте)

$$W_{nk} = \frac{|U_{nk}|^2}{\hbar^2} \cdot \frac{4\tau^2}{(1 + \omega_{nk}^2\tau^2)^2}.$$

Эта формула применима, когда  $W_{nk} \ll 1$ . Вероятность перехода стремится к нулю и при  $\tau \rightarrow 0$ , и при  $\tau \rightarrow \infty$ . Переход из одного состояния в другое связан с передачей импульса системе. При ограниченном потенциале и малом времени  $\tau$  воздействия на систему, передача импульса и, соответственно, вероятность перехода стремятся к нулю. При медленном включении и выключении возмущения (большое время  $\tau$ ) воздействие на систему происходит адиабатически, и переходы не происходят. Вероятность перехода достигает максимума, когда  $\tau \sim 1/\omega_{nk}$ . Это утверждение является общим и не зависит от конкретного вида возмущения.

## 27.2. Случай возмущения $\hat{V}(x, t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow -\infty$ и $\hat{V}(x, t) \rightarrow U(x) \neq 0$ при $t \rightarrow \infty$

Мы будем также считать, что  $\partial\hat{V}(x, t)/\partial t \rightarrow 0$  при  $t \rightarrow \infty$ . В этом случае задача ставится так. Пусть при  $t \rightarrow -\infty$  частица находилась в состоянии  $\psi_k(x)$ , которое является собственной функцией гамильтониана  $\hat{H}_0$ . Надо найти вероятность того, что при  $t \rightarrow +\infty$  частица будет находиться в состоянии  $\tilde{\psi}_n(x)$ , которое является собственной функцией гамильтониана  $\hat{H}_0 + U(x)$ . Считая возмущение  $U(x)$  малым, запишем  $\tilde{\psi}_n(x)$  в первом порядке стационарной теории возмущений в виде

$$\tilde{\psi}_n(x) = \psi_n(x) + \sum_{m \neq n} \psi_m(x) \frac{U_{mn}}{E_n - E_m}.$$

Поэтому

$$\int dx \tilde{\psi}_n^*(x) \Psi(x, t) = e^{-iE_n t/\hbar} a_n(t) + \frac{U_{nk}}{E_n - E_k} e^{-iE_k t/\hbar}, \quad (258)$$

где мы учли, что  $U_{nk} = U_{kn}^*$ . Преобразуем формулу (256), используя интегрирование по частям

$$a_n(t) = -\frac{V_{nk}(t)}{E_n - E_k} e^{i\omega_{nk}t/\hbar} + \frac{1}{E_n - E_k} \int_{-\infty}^t \frac{\partial V_{nk}(t')}{\partial t'} e^{i\omega_{nk}t'} dt'. \quad (259)$$

Подставляя это представление в формулу (258) и устремляя  $t \rightarrow \infty$ , находим вероятность перехода

$$W_{nk} = |a_n(\infty)|^2 = \frac{1}{(\hbar\omega_{nk})^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial V_{nk}(t)}{\partial t} e^{i\omega_{nk}t} dt \right|^2. \quad (260)$$

Заметим, что эта формула справедлива и в первом, и во втором случае.

Рассмотрим возмущение  $\hat{V}(x, t) = U(x) (1 - e^{-t/\tau}) \theta(t)$ . Используя полученную формулу, получаем

$$W_{nk} = \frac{|U_{nk}|^2}{(\hbar\omega_{nk})^2} \cdot \frac{1}{(1 + \omega_{nk}^2 \tau^2)}.$$

По-прежнему, при  $\tau \rightarrow \infty$  вероятность перехода обращается в ноль (адиабатическое возмущение). Однако, при  $\tau = 0$  вероятность перехода не обращается в ноль, так как возмущение мгновенно включается, но не выключается:

$$W_{nk} = \frac{|U_{nk}|^2}{(\hbar\omega_{nk})^2}.$$

Эту формулу для произвольного слабого, быстро включаемого возмущения ( $\tau|\omega_{nk}| \ll 1$ ), можно легко получить из (260), если выбросить экспоненту в подынтегральном выражении.

### 27.3. Случай возмущения, которое включается мгновенно, но не является слабым

В этом случае можно использовать следующий подход. Предположим, что мы знаем все собственные функции  $\Psi_n(x)$  полного гамильтониана при  $t < 0$  и все собственные функции  $\Xi_n(x)$  полного гамильтониана при  $t > 0$ . Тогда вероятность перехода равна

$$W_{nk} = \left| \int dx \Xi_n^*(x) \Psi_k(x) \right|^2.$$

Рассмотрим, например, следующую задачу. Пусть атом водорода с электроном в основном состоянии движется со скоростью  $\mathbf{v}$  и останавливается в момент времени  $t = 0$ . Найти вероятность того, что электрон останется в основном состоянии. Как следует из преобразования Галилея для уравнения

Шредингера, волновая функция электрона при  $t < 0$  в движущемся атоме равна

$$\Psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad \mathbf{k} = m\mathbf{v}/\hbar,$$

а при  $t > 0$  в покоящемся атоме равна

$$\psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}a_B^{3/2}} \exp(-r/a_B).$$

В результате для вероятности остаться в основном состоянии находим

$$W = \left| \int d^3r \frac{1}{\pi a_B^3} \exp(-2r/a_B + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \right|^2 = \frac{1}{(1 + k^2 a_B^2/4)^4}.$$

## 27.4. Адиабатические переходы

В этом случае изменение гамильтониана не считается малым, а производная гамильтониана по времени мала (критерий применимости обсудим ниже). Предположим, что мы знаем все собственные функции  $\psi_n(x, t)$  и соответствующие собственные значения  $\mathcal{E}_n(t)$  зависящего от времени гамильтониана  $\hat{H}(x, t)$ ,

$$\hat{H}(x, t)\psi_m(x, t) = \mathcal{E}_m(t)\psi_m(x, t). \quad (261)$$

Подчеркнём, что зависящая от времени функция  $\mathcal{E}_m(t)$  не является энергией системы в момент времени  $t$ .

Будем также предполагать отсутствие вырождения. Подставим в уравнение Шредингера

$$i\hbar\partial\Psi(x, t)/\partial t = \hat{H}(x, t)\Psi(x, t)$$

решение  $\Psi(x, t)$ , записанное в виде

$$\Psi(x, t) = \sum_m a_m(t) \exp\left[-i \int_0^t \mathcal{E}_m(t') dt' / \hbar\right] \psi_m(x, t),$$

умножим левую и правую части на  $\psi_n^*(x, t)$  и проинтегрируем по  $dx$ , получим

$$\dot{a}_n = - \sum_m \exp\left[i \int_0^t \omega_{nm}(t') dt'\right] \left[ \int dx \psi_n^*(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi_m(x, t) \right] a_m(t),$$

где  $\omega_{nm}(t) = [\mathcal{E}_n(t) - \mathcal{E}_m(t)]/\hbar$ . Продифференцируем (261) по времени, умножим левую и правую части на  $\psi_n^*(x, t)$  и проинтегрируем по  $dx$ , получим

$$\begin{aligned} \int dx \psi_n^*(x, t) \frac{\partial}{\partial t} \psi_m(x, t) &= -\frac{\dot{H}_{nm}}{\hbar\omega_{nm}(t)}, \\ \dot{H}_{nm} &= \int dx \psi_n^*(x, t) \left[ \frac{\partial}{\partial t} \hat{H}(x, t) \right] \psi_m(x, t). \end{aligned} \quad (262)$$

Считая, что  $a_k = 1$  при  $t \rightarrow -\infty$  и вероятности переходов малы, получаем уравнение на  $a_n(t)$  в первом порядке теории возмущений

$$\dot{a}_n = \frac{\dot{H}_{nk}}{\hbar\omega_{nk}(t)} \exp \left[ i \int_0^t \omega_{nk}(t') dt' \right].$$

Окончательно, для вероятности перехода находим

$$W_{nk} = \left| \int_{-\infty}^{\infty} dt \frac{\dot{H}_{nk}}{\hbar\omega_{nk}(t)} \exp \left[ i \int_0^t \omega_{nk}(t') dt' \right] \right|^2. \quad (263)$$

Эта формула справедлива, если  $W_{nk} \ll 1$ . Видно, что в любой момент времени величина  $\omega_{nk}(t)$  не должна обращаться в ноль. Заметим, что полученная формула (263) справедлива также для случая, когда возмущение  $\hat{V}(x, t)$  адиабатически включается, но не выключается.

**Задача 27.1.** Рассмотрим одномерный осциллятор в однородном зависящем от времени поле:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\Omega^2 x^2}{2} - F(t)x, \quad F(t) = F_0 \frac{t\tau}{t^2 + \tau^2}.$$

Используя (263), показать, что вероятность возбуждения осциллятора, который при  $t \rightarrow -\infty$  находился в основном состоянии, равна

$$W = \frac{1}{2m\hbar\Omega} (\pi F_0\tau e^{-\Omega\tau})^2.$$

## 27.5. Периодическое возмущение

Рассмотрим возмущение вида

$$\hat{V}(x, t) = U(x)e^{-i\nu t} + U^*(x)e^{i\nu t}.$$

Тогда из (256) находим выражения для амплитуды перехода

$$a_n(\infty) = \frac{2\pi}{i\hbar} [U_{nk}\delta(\omega_{nk} - \nu) + U_{nk}^*\delta(\omega_{nk} + \nu)] \quad (264)$$

и для вероятности перехода

$$W_{nk} = \frac{2\pi T}{\hbar^2} \left[ |U_{nk}|^2 \delta(\omega_{nk} - \nu) + |U_{nk}|^2 \delta(\omega_{nk} + \nu) \right]. \quad (265)$$

Здесь мы учли, что  $\delta^2(\Omega) = \delta(\Omega)\delta(0)$  и  $2\pi\delta(0) = T$ , где  $T$  — полный интервал интегрирования по времени. Поэтому при периодическом возмущении нужно говорить не о полной вероятности перехода, а о вероятности перехода в единицу времени,  $\dot{W}_{nk} = W_{nk}/T$ :

$$\dot{W}_{nk} = \frac{2\pi}{\hbar} \left[ |U_{nk}|^2 \delta(E_n - E_k - \hbar\nu) + |U_{nk}|^2 \delta(E_n - E_k + \hbar\nu) \right]. \quad (266)$$

Аргументы  $\delta$ -функций отвечают закону сохранения энергии в процессе поглощения кванта (первое слагаемое) или излучения кванта (второе слагаемое). Формула (266) называется «золотым правилом Ферми». В общем случае, когда переход идёт в состояние непрерывного спектра, правую часть уравнения (266) надо умножить на плотность конечных состояний

$$d\rho = \frac{d^3p V}{(2\pi\hbar)^3},$$

на каждую частицу в непрерывном спектре в конечном состоянии. Здесь  $V$  — нормировочный объём,  $\mathbf{p}$  — импульс частицы на больших расстояниях. Каждая волновая функция непрерывного спектра (как в конечном, так и в начальном состоянии), нормированная на одну частицу в объёме  $V$ , должна содержать множитель  $1/\sqrt{V}$ . Если вычисляется физически осмысленная величина, то нормировочный объём  $V$  в ответе должен сократиться. Рассмотрим несколько примеров применения правила Ферми.

## 27.6. Фотоэффект

Рассмотрим атом водорода с электроном в основном состоянии под действием электромагнитной волны, описываемой вектор-потенциалом  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ :

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 e^{-i\omega t + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + \mathbf{A}_0^* e^{i\omega t - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{k} = 0, \quad \omega = ck.$$

Нас будет интересовать вероятность вылета электрона из атома в единицу времени (фотоэффект). Рассмотрим простейший случай, когда

$$mc^2 \gg \hbar\omega \gg e^2/a_B.$$

Тогда энергия вылетевшего электрона  $p^2/(2m) = \hbar\omega - Ry \approx \hbar\omega$  и скорость  $v = p/m \gg e^2/\hbar$ , т. е. выполнено условие применимости теории возмущений по кулоновскому полю для электрона в конечном состоянии. Поэтому электрон в конечном состоянии можно описывать плоской волной  $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar)/\sqrt{V}$ . Заметим, что

$$\frac{p}{\hbar k} \approx \frac{\sqrt{2m\hbar\omega}}{(\hbar\omega/c)} = \sqrt{\frac{2mc^2}{\hbar\omega}} \gg 1.$$

Используя правило Ферми для возмущения  $U = -e/(mc)\mathbf{A}\cdot(-i\hbar\nabla)$ , находим

$$d\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \int d^3r \frac{e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}} \frac{e}{mc} \mathbf{A}_0 \cdot \hat{\mathbf{P}} \psi_0(r) \right|^2 \delta\left(\frac{p^2}{2m} - \hbar\omega\right) \frac{d^3p V}{(2\pi\hbar)^3}, \quad (267)$$

где  $\hat{\mathbf{P}}$  — оператор импульса. В аргументе дельта-функции и в матричном элементе мы учли, что, соответственно,  $\hbar\omega \gg |E_0|$  и  $\hbar k \ll p$ . Видно, что

нормировочный объём  $V$ , как и должно быть, сокращается. Воспользуемся эрмитовостью оператора  $\mathbf{P}$  и подействуем им налево на плоскую волну. Кроме того, представим  $d^3p$  в виде

$$d^3p = p^2 dp d\Omega_p = mp d\left(\frac{p^2}{2m}\right) d\Omega_p,$$

где  $d\Omega_p$  — телесный угол импульса вылетевшего электрона, и возьмём интеграл по энергии вылетевшего электрона. После этого вычисляем матричный элемент и получаем

$$d\dot{W} = \frac{2\pi mp d\Omega_p}{\hbar(2\pi\hbar)^3} \left| \frac{8e}{mc} \mathbf{A}_0 \cdot \mathbf{p} \sqrt{\pi a_B^3} \left(\frac{\hbar}{pa_B}\right)^4 \right|^2 = \frac{64}{\pi} \omega_0 \frac{|\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}_0|^2 a_B^3}{\hbar\omega} \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{7/2} d\Omega_p,$$

где  $\omega_0 = Ry/\hbar$  и  $\boldsymbol{\mathcal{E}}_0 = i\omega \mathbf{A}_0/c$ ,  $p = \sqrt{2m\hbar\omega}$ ,  $\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$ . Величина  $\dot{W}$  связана с сечением фотоэффекта с помощью соотношения

$$d\dot{W} = j d\sigma, \quad j = \frac{S}{\hbar\omega}, \quad S = \frac{c}{4\pi} |\overline{\boldsymbol{\mathcal{E}}^2}| = \frac{c}{2\pi} |\boldsymbol{\mathcal{E}}_0|^2.$$

Окончательно получаем для дифференциального и полного сечений:

$$d\sigma = 64\alpha a_B^2 \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{7/2} \frac{|\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}_0|^2}{|\boldsymbol{\mathcal{E}}_0|^2} d\Omega_p, \quad \sigma = \frac{256\pi}{3} \alpha a_B^2 \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^{7/2}.$$

## 27.7. Правило Ферми и сечение рассеяния в борновском приближении

Рассмотрим сечение упругого рассеяния частицы в потенциале  $U(\mathbf{r})$  как переход из состояния непрерывного спектра в состояние непрерывного спектра. По правилу Ферми

$$\begin{aligned} d\dot{W} &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \int d^3r \frac{e^{-i\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}} U(\mathbf{r}) \frac{e^{i\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{r}/\hbar}}{\sqrt{V}} \right|^2 \frac{d^3p_2 V}{(2\pi\hbar)^3} \delta\left(\frac{p_2^2}{2m} - \frac{p_1^2}{2m}\right) = \\ &= \frac{mp}{V(2\pi)^2 \hbar^4} |U_{\mathbf{q}}|^2 d\Omega_{p_2}, \quad U_{\mathbf{q}} = \int d^3r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} U(\mathbf{r}), \quad \mathbf{q} = \frac{\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1}{\hbar}. \end{aligned} \quad (268)$$

Физический смысл имеет не вероятность  $d\dot{W}$ , которая содержит фиктивный объём  $V$ , а сечение  $d\sigma$ , которое связано с  $d\dot{W}$  соотношением

$$d\sigma = \frac{d\dot{W}}{j}, \quad j = \rho v_1 = \frac{p_1}{mV}.$$

Окончательно получаем

$$d\sigma = \left| \frac{m}{2\pi\hbar^2} U_{\mathbf{q}} \right|^2 d\Omega_{p_2}.$$

Видно, что  $m/(2\pi\hbar^2)U_{\mathbf{q}}$  с точностью до знака совпадает с амплитудой рассеяния  $f(\mathbf{q})$ . Для рассеяния в кулоновском поле  $U_{\mathbf{q}} = -4\pi e^2/q^2$ .

Использование правила Ферми также очень удобно для нахождения сечения неупругого рассеяния, когда атом после рассеяния электрона переходит в возбуждённое состояние. Рассмотрим, например, рассеяние электрона на атоме водорода, находящемся в основном состоянии, с переходом в возбуждённое состояние. В этом случае

$$d\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \iint d^3R d^3r \frac{e^{-i\mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{R}/\hbar}}{\sqrt{V}} \psi_2^*(\mathbf{r}) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|} \frac{e^{i\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{R}/\hbar}}{\sqrt{V}} \psi_1(\mathbf{r}) \right|^2 \times$$

$$\times \frac{d^3p_2 V}{(2\pi\hbar)^3} \delta(E_2 + \frac{p_2^2}{2m} - E_1 - \frac{p_1^2}{2m}) = \frac{m p_2}{V(2\pi)^2 \hbar^4} |U_{\mathbf{q}}|^2 |F_{\mathbf{q}}|^2 d\Omega_{\mathbf{p}_2}, \quad (269)$$

$$U_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi e^2}{q^2}, \quad F_{\mathbf{q}} = \int d^3r e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \psi_2^*(\mathbf{r}) \psi_1(\mathbf{r}), \quad \mathbf{q} = \frac{\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1}{\hbar}.$$

Здесь учтено, что к возбуждению атомного электрона может привести только электрон-электронное взаимодействие, а взаимодействие налетающего электрона с ядром не может. Величина  $F_{\mathbf{q}}$  называется неупругим формфактором. Так как  $p_2 \neq p_1$ , то  $q$  не может обратиться в ноль. Минимальное значение  $q$  достигается при рассеянии на нулевой угол. Далее вычисляем простой интеграл по  $d^3R$  (преобразование Фурье кулоновского потенциала). В результате для сечения  $d\sigma = d\dot{W}/j$  находим

$$d\sigma = \frac{4p_2}{p_1 a_B^2 q^4} |F_{\mathbf{q}}|^2 d\Omega_{\mathbf{p}_2}.$$

Используя правило Ферми, легко получить формулу для рассеяния в релятивистском случае. Для этого воспользуемся соотношением  $\epsilon^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4$ , из которого следует, что для релятивистской частицы  $p dp = \epsilon d\epsilon/c^2$ . Кроме того,  $j = \rho v = pc^2/(\epsilon V)$ . В результате, для сечения рассеяния получаем

$$d\sigma = \left| \frac{\epsilon}{2\pi\hbar^2 c^2} U_{\mathbf{q}} \right|^2 |u_2^+ u_1|^2 d\Omega_{\mathbf{p}_2},$$

где  $u_1$  и  $u_2$  — дираковские спиноры, соответственно, начального и конечного состояния, нормированные следующим образом:

$$u_2^+ u_2 = u_1^+ u_1 = 1.$$

**Задача 27.2.** Показать, что величина  $R = |u_2^+ u_1|^2$ , усреднённая по спинам начального электрона и просуммированная по спинам конечного электрона, равна

$$R = 1 - \frac{v^2}{c^2} \sin^2(\theta/2),$$

где  $\theta$  — угол рассеяния. Показать, что ответ не изменится, если просуммировать по спинам конечного электрона, но не усреднять по спинам начального.

Видно, что сечение рассеяния назад ( $\theta = \pi$ ) подавлено для релятивистских частиц со спином  $1/2$  как  $1/\gamma^2$  по сравнению с сечением для частиц с нулевым спином, которое не содержит множитель  $R$ .

Подавление  $1/\gamma^2$  при рассеянии назад связано с сохранением спиральности в рассеянии при высоких энергиях. Представим себе, что налетающий электрон имеет, например, положительную спиральность, т. е. спин электрона направлен по его импульсу. Тогда  $J_z = 1/2$ , так как  $l_z = 0$ . Поскольку проекция полного момента на ось  $z$  сохраняется, то при рассеянии назад  $s_z$  по-прежнему равен  $1/2$  (проекция орбитального момента на направление движения равна нулю). То есть спиральность конечного электрона стала отрицательной! Так как амплитуда рассеяния с изменением спиральности подавлена как  $1/\gamma$ , то вероятность подавлена как  $1/\gamma^2$ .

## 27.8. Квантование электромагнитного поля

Рассмотрим свободное электромагнитное поле в кулоновской калибровке  $A^0 = 0$ ,  $\text{div} \mathbf{A} = 0$ , описываемое вектор-потенциалом  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ . Как мы знаем, энергия электромагнитного поля равна

$$E = \int d^3r \frac{\boldsymbol{\varepsilon}^2 + \mathcal{H}^2}{8\pi}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}, \quad \mathcal{H} = \nabla \times \mathbf{A}. \quad (270)$$

Перейдём от  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  к Фурье-гармонике  $\mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t)$ , удовлетворяющей условию поперечности  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t) = 0$  и подчиняющейся волновому уравнению

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t) + \omega_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{A}_{\mathbf{k}}(t) = 0, \quad \omega_{\mathbf{k}} = ck.$$

Таким образом, каждая мода колебаний соответствует гармоническому осциллятору с частотой  $\omega_{\mathbf{k}}$ , причём в уравнении (270)  $\boldsymbol{\varepsilon}^2 = \dot{\mathbf{A}}_{\mathbf{k}}^2/c^2$  играет роль кинетической энергии, а  $\mathcal{H}^2 = k^2 \mathbf{A}_{\mathbf{k}}^2(t)$  играет роль потенциальной энергии. Как мы знаем, гармонический осциллятор удобно рассматривать в терминах понижающего ( $\hat{a}$ ) и повышающего ( $\hat{a}^+$ ) операторов, удовлетворяющих соотношениям

$$\begin{aligned} [\hat{a}, \hat{a}^+] &= 1, \quad \hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle, \quad \hat{a}^+ |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \\ \hat{a}^+ \hat{a} |n\rangle &= n |n\rangle, \quad \hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^+ \hat{a} + 1/2). \end{aligned} \quad (271)$$

Понижающие  $\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}$  и повышающие  $\hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^+$  операторы для фотонов называются операторами уничтожения и рождения фотонов с волновым вектором  $\mathbf{k}$  и поляризацией  $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}$ , индекс  $\lambda = \pm 1$  нумерует две возможные поляризации, перпендикулярные  $\mathbf{k}$ . Функция  $|n_{\mathbf{k},\lambda}\rangle$  обозначает состояние с  $n_{\mathbf{k},\lambda}$  фотонами с волновым вектором  $\mathbf{k}$  и поляризацией  $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}$ . Вектора  $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}$  могут быть как вещественными, если в качестве базиса выбраны линейные поляризации фотонов,



так и комплексные, если в качестве базиса выбраны циркулярные поляризации фотонов. В терминах операторов рождения и уничтожения, вектор-потенциал  $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)$  имеет вид

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda=\pm 1} \int \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3} N_k \left[ \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda}^+ \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}^* e^{i\omega_{\mathbf{k}} t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right]. \quad (272)$$

Волновая функция электромагнитного поля описывается числами заполнения  $n_{\mathbf{k}, \lambda}$ , где  $n_{\mathbf{k}, \lambda}$  является номером уровня осциллятора, нумеруемого числами  $\mathbf{k}$  и  $\lambda$ . Иначе говоря, величина  $n_{\mathbf{k}, \lambda}$  является числом фотонов с волновым вектором  $\mathbf{k}$  и поляризацией  $\lambda$ . Поскольку волновая функция электромагнитного поля в представлении чисел заполнения от времени не зависит, т. е. является гейзенберговской волновой функцией, то оператор (272) является гейзенберговским оператором.

Нормировочный коэффициент  $N_k$  определяется из условия того, что гамильтониан свободного электромагнитного поля имеет вид

$$\hat{H} = \sum_{\lambda=\pm 1} \int \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3} \hbar \omega_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda}^+ \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda} + 1/2),$$

который соответствует сумме по  $\mathbf{k}$  и  $\lambda$  осцилляторных гамильтонианов, выраженных через повышающий и понижающий операторы (операторы рождения и уничтожения фотона), см. (271).

Используя (270), находим

$$N_k = \sqrt{\frac{2\pi \hbar c^2}{\omega_{\mathbf{k}} V}}. \quad (273)$$

Коэффициент  $N_k$  содержит нормировочный объём  $V$ , однако, как уже говорилось, объём должен сокращаться во всех осмысленных ответах. Выражения для квантованного электрического и магнитного полей равны

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{E}}(\mathbf{r}, t) &= \frac{i}{c} \sum_{\lambda=\pm 1} \int \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3} N_k \omega_{\mathbf{k}} \left[ \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda} e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda}^+ \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}^* e^{i\omega_{\mathbf{k}} t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right], \\ \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}, t) &= i \sum_{\lambda=\pm 1} \int \frac{V d^3 k}{(2\pi)^3} N_k \left\{ \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda} [\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}] e^{-i\omega_{\mathbf{k}} t + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k}, \lambda}^+ [\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k}, \lambda}^*] e^{i\omega_{\mathbf{k}} t - i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \right\}. \end{aligned}$$

Оператор взаимодействия электрона с квантованным электромагнитным полем равен

$$\delta \hat{H} = -\frac{e}{m_e c} \left( \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hbar \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}, t) \right) + \frac{e^2}{2m_e c^2} \hat{\mathbf{A}}^2(\mathbf{r}, t). \quad (274)$$

С помощью этого оператора можно вычислить вероятности любых процессов с участием фотонов в случае, когда электрон можно считать нерелятивистским. Обратим внимание на то, что в выражении (274) для  $\delta\hat{H}$  оператор  $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)$  явно зависит от времени, см. (272). Поэтому для вычисления вероятностей необходимо использовать временную теорию возмущений. При этом волновая функция электромагнитного поля, которая определяется числами фотонов  $n_{\mathbf{k},\lambda}$ , от времени не зависит. Если опустить в выражениях  $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{r}, t)$ ,  $\hat{\mathcal{E}}(\mathbf{r}, t)$  и  $\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{r}, t)$  зависимость от времени, как это часто делается, то в волновую функцию электромагнитного поля необходимо добавить множитель  $\prod_{\mathbf{k},\lambda} \exp[-i(n_{\mathbf{k},\lambda} + 1/2)\omega_{\mathbf{k},\lambda}t]$ . В этом случае можно использовать формулы стационарной теории возмущений.

## РАЗДЕЛ 28. ИЗЛУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН

Рассмотрим радиационный переход между атомными уровнями с излучением фотона с частотой  $\omega$ . Если переход идёт между состояниями с разными главными квантовыми числами, то  $kr$  в вектор-потенциале можно оценить как

$$kr = \omega r/c \sim \text{Ry } a_B/(\hbar c) \sim (e^2/a_B)a_B/(\hbar c) \sim e^2/(\hbar c) = \alpha \ll 1.$$

Поэтому экспоненту в вектор-потенциале можно разлагать по  $kr$ . Количество членов разложения по  $kr$ , которые необходимо удержать, зависит от конкретных переходов.

### 28.1. Электрическое дипольное излучение

Заменив экспоненту на единицу, получаем из правила Ферми

$$d\dot{W} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{e}{mc} \int d^3r \psi_2^*(\mathbf{r}) \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^* \cdot \hat{\mathbf{p}} \psi_1(\mathbf{r}) \right|^2 \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V} \delta(\hbar\omega - \hbar\omega_0) \frac{d^3k V}{(2\pi)^3}, \quad (275)$$

где  $\hbar\omega_0 = E_1 - E_2$ . Здесь  $E_1$  и  $E_2$  — энергии, соответственно, начального и конечного состояния электрона в атоме, описываемого волновыми функциями  $\psi_1(\mathbf{r})$  и  $\psi_2(\mathbf{r})$ . Видно, что нормировочный объём сокращается. Заменяем  $d^3k$  на  $\omega^2 d\omega d\Omega_{\mathbf{k}}/c^3$  и интегрируем по  $\omega$ . Кроме того, используем операторное соотношение

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

В результате получаем

$$d\dot{W} = \frac{\omega_0^3}{2\pi\hbar c^3} |\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^* \cdot \mathbf{d}_{21}|^2 d\Omega_{\mathbf{k}}, \quad \mathbf{d}_{21} = e \int d^3r \psi_2^*(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi_1(\mathbf{r}). \quad (276)$$

**Задача 28.1.** Показать, что если усреднить  $d\dot{W}$  по проекциям углового момента начального состояния и просуммировать по проекциям углового момента конечного состояния, то угловое распределение вылетевших фотонов будет изотропно. Оно не будет зависеть от поляризации фотона и будет равно

$$d\dot{W} = \frac{\omega_0^3 e^2}{6\pi\hbar c^3 (2l_1 + 1)} |r_{21}|^2 [l_1 \delta_{l_1, l_2+1} + l_2 \delta_{l_2, l_1+1}] d\Omega_{\mathbf{k}}, \quad (277)$$

$$r_{21} = \int_0^\infty R_2(r) R_1(r) r^3 dr.$$

Здесь  $R_1(r)$  и  $R_2(r)$  — радиальные функции начального и конечного состояний с угловыми моментами  $l_1$  и  $l_2$ , соответственно. Указание: воспользоваться

соотношениями

$$\sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\mathbf{n}) Y_{lm}(\mathbf{n}') = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}'), \quad (278)$$

$$x P_l(x) = \frac{(l+1) P_{l+1}(x) + l P_{l-1}(x)}{2l+1}.$$

Здесь  $P_l(x)$  — полиномы Лежандра.

С помощью формулы

$$\sum_{\lambda=1,2} e_{\mathbf{k},\lambda}^{*a} e_{\mathbf{k},\lambda}^b = \delta^{ab} - n^a n^b, \quad \mathbf{n} = \mathbf{k}/k,$$

просуммируем по двум поляризациям вылетевших фотонов. Напомним, что эти поляризации поперечны волновому вектору  $\mathbf{k}$ . В результате получаем

$$d\dot{W} = \frac{\omega_0^3}{2\pi\hbar c^3} |\mathbf{n} \times \mathbf{d}_{21}|^2 d\Omega_{\mathbf{k}}. \quad (279)$$

Проинтегрировав по углам вылета фотона, находим полную вероятность излучения в единицу времени

$$\dot{W} = \frac{4\omega_0^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{d}_{21}|^2. \quad (280)$$

Мы получили так называемую формулу для вероятности электрического дипольного перехода. Поскольку  $\mathbf{d}_{21}$  — это матричный элемент векторного оператора с отрицательной чётностью, то он отличен от нуля только для переходов между состояниями, для которых орбитальный момент  $l$  отличается на единицу, т. е.  $\Delta l = l_2 - l_1 = \pm 1$ . Например, переход  $2p \rightarrow 1s$ . При этом  $\Delta J = \pm 1, 0$ . Например, переходы  $2p_{3/2} \rightarrow 2s_{1/2}$  и  $2p_{1/2} \rightarrow 2s_{1/2}$ .

Если просуммировать  $\dot{W}$  по проекциям  $m_2$  углового момента конечного состояния, то эта сумма не будет зависеть от проекции момента начального состояния:

$$\sum_{m_2=-l_2}^{l_2} \dot{W} = \frac{4\omega_0^3 e^2}{3\hbar c^3 (2l_1 + 1)} |r_{21}|^2 [l_1 \delta_{l_1, l_2+1} + l_2 \delta_{l_2, l_1+1}], \quad (281)$$

$$r_{21} = \int_0^\infty R_2(r) R_1(r) r^3 dr.$$

Интенсивность излучения  $dI$  связана с  $d\dot{W}$  соотношением  $dI = \hbar\omega_0 d\dot{W}$ . Формула для  $dI$  не содержит постоянной Планка и напоминает формулу классической электродинамики с той лишь разницей, что вместо преобразования Фурье дипольного момента  $\mathbf{d}_\omega$  стоит матричный элемент  $\mathbf{d}_{21}$  оператора дипольного момента.

Время жизни уровня  $\tau$  и ширина уровня  $\Gamma$  (её часто называют естественной шириной спектральной линии) связаны с  $\dot{W}$  соотношением

$$\tau = \frac{1}{\dot{W}}, \quad \Gamma = \hbar \dot{W}.$$

Оценим отношение  $\Gamma/(\hbar\omega_0)$  для переходов с  $\hbar\omega_0 \sim Ry \sim e^2/a_B$ . Имеем

$$\frac{\Gamma}{\hbar\omega_0} \sim \frac{\omega_0^2 e^2 a_B^2}{\hbar c^3} \sim \frac{e^2 a_B^2}{\hbar c^3} \left( \frac{e^2}{\hbar a_B} \right)^2 \sim \alpha^3.$$

## 28.2. Магнитно-дипольный и электрический квадрупольный переходы

Обсудим теперь, что делать если  $\Delta l = 0$  или  $\Delta l = \pm 2$ . В этом случае электрический дипольный момент не работает. Для  $\Delta l = 0$  вклад дают магнитно-дипольный переход и электрический квадрупольный переход, а для  $\Delta l = \pm 2$  даёт вклад только электрический квадрупольный переход. Для того чтобы получить формулы для соответствующих вероятностей переходов, учтём первый член разложения экспоненты в вектор-потенциале фотона и рассмотрим преобразование

$$\begin{aligned} -i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})(\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^* \cdot \hat{\mathbf{p}}) &= -\frac{i}{2} k^a e_{\mathbf{k},\lambda}^{*b} \left\{ (r^a \hat{p}^b + \hat{p}^a r^b) + (r^a \hat{p}^b - \hat{p}^a r^b) \right\} = \\ &= k^a e_{\mathbf{k},\lambda}^{*b} \left\{ \frac{m}{6\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}^{ab}] - \frac{i\hbar}{2} \epsilon^{abn} \hat{l}^n \right\} = \frac{m}{6\hbar} [\hat{H}, \hat{Q}^{ab} k^a e_{\mathbf{k},\lambda}^{*b}] - \frac{i\hbar}{2} [\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^*] \cdot \hat{\mathbf{l}}, \quad (282) \\ &\Rightarrow -\frac{m\omega_{\mathbf{k}}}{6} \hat{Q}^{ab} k^a e_{\mathbf{k},\lambda}^{*b} - \frac{i}{2} \hbar [\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^*] \cdot \hat{\mathbf{l}}. \end{aligned}$$

Здесь  $\hat{H}$  — гамильтониан,  $\hat{Q}^{ab} = 3r^a r^b - \delta^{ab} r^2$  — оператор квадрупольного момента,  $\hat{\mathbf{l}}$  — оператор углового момента. Выше мы учли, что

$$\delta^{ab} k^a e_{\mathbf{k},\lambda}^{*b} = 0, \quad \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \mathbf{r}].$$

Знак  $\Rightarrow$  в (282) означает, что операторы становятся эквивалентными при вычислении матричного элемента по состояниям с определёнными энергиями. Первое слагаемое, содержащее  $\hat{Q}^{ab}$ , отвечает квадрупольному переходу, а второе слагаемое, содержащее  $\hat{\mathbf{l}}$ , отвечает магнитно-дипольному переходу. Отношение первого слагаемого ко второму можно оценить как

$$\frac{m\omega a_B^2}{\hbar} \sim \frac{\hbar\omega}{Ry}.$$

Поскольку второе слагаемое содержит только оператор момента  $\hat{\mathbf{l}}$ , который коммутирует с оператором  $\hat{l}^2$ , то оно не может иметь ненулевые матричные

элементы между состояниями с разными орбитальными моментами и разными главными квантовыми числами. Оно важно, в основном, для переходов между компонентами тонкой структуры (например,  $2p_{3/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ ), для которых  $\hbar\omega/Ry \sim \alpha^2$ . Оператор квадрупольного перехода имеет правила отбора  $\Delta l = \pm 2, 0$ , т. е. переход может идти между состояниями с разными главными квантовыми числами (например, переходы  $3p \rightarrow 2p$  или  $3d \rightarrow 1s$ ).

Используя формулу (274), находим поправку к гамильтониану, отвечающую за излучение фотона при магнитно-дипольном переходе

$$\delta\hat{H} = iN_k[\mathbf{k} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^*] \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}, \quad \hat{\boldsymbol{\mu}} = \frac{e\hbar}{2m_e c}(\hat{\mathbf{l}} + 2\hat{\mathbf{s}}), \quad N_k = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k V}}. \quad (283)$$

Из правила Ферми находим

$$d\dot{W} = \frac{\omega_k^3 d\Omega_k}{2\pi\hbar c^3} |[\mathbf{n} \times \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^*] \cdot \boldsymbol{\mu}_{21}|^2, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{k}}{k}, \quad \boldsymbol{\mu}_{21} = \int d^3r \psi_2^*(\mathbf{r}) \hat{\boldsymbol{\mu}} \psi_1(\mathbf{r}). \quad (284)$$

Дифференциальная вероятность, просуммированная по поляризациям фотона, и полная вероятность равны

$$d\dot{W} = \frac{\omega_k^3}{2\pi\hbar c^3} |\mathbf{n} \times \boldsymbol{\mu}_{21}|^2 d\Omega_k, \quad \dot{W} = \frac{4\omega_k^3}{3\hbar c^3} |\boldsymbol{\mu}_{21}|^2. \quad (285)$$

Эти формулы совпадают с соответствующими формулами для электрического дипольного перехода после замены  $\boldsymbol{\mu}_{21} \rightarrow \mathbf{d}_{21}$ . Заметим, что имеет место оценка  $\mu_{21}/d_{21} \sim \lambda_C/a_B \sim \alpha$ , где  $\lambda_C = \hbar/(mc)$  — комптоновская длина волны электрона. Приведём для справки полную вероятность электрического квадрупольного перехода

$$\dot{W} = \frac{e^2\omega_k^5}{90\hbar c^5} Q_{21}^{ab} Q_{21}^{ab*}, \quad Q_{21}^{ab} = \int d^3r \psi_2^*(\mathbf{r}) \hat{Q}^{ab} \psi_1(\mathbf{r}). \quad (286)$$

Видно, что у электрического квадрупольного перехода зависимость вероятности от  $\omega_k$  отличается от случая электрического и магнитно-дипольного переходов. В случае, если  $\hbar\omega_k \sim Ry$ , вероятность электрического квадрупольного перехода можно оценить как

$$\dot{W} \sim \omega_k \frac{e^2 a_B^4}{\hbar c^5} \left( \frac{e^2}{\hbar a_B} \right)^4 \sim \omega_k \alpha^5,$$

т. е. она в  $\sim \alpha^2$  раз меньше вероятности электрического дипольного перехода.

### 28.3. Индуцированное излучение

Пусть на атом падает излучение со спектральной плотностью  $I_{\mathbf{k}\lambda}$  и поляризацией  $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}$ . Это означает, что

$$c\hbar\omega_k n_{\mathbf{k}\lambda} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} = I_{\mathbf{k}\lambda} d\omega_k d\Omega_k,$$

где  $n_{\mathbf{k}\lambda}$  — число фотонов с волновым вектором  $\mathbf{k}$  и поляризацией  $\lambda$ . Отсюда следует связь между  $n_{\mathbf{k}\lambda}$  и  $I_{\mathbf{k}\lambda}$ :

$$n_{\mathbf{k}\lambda} = \frac{c^2(2\pi)^3}{\hbar\omega_{\mathbf{k}}^3} I_{\mathbf{k}\lambda}.$$

С учётом того, что

$$\hat{a}_{\mathbf{k}\lambda}^+ |n_{\mathbf{k}\lambda}\rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}\lambda} + 1} |n_{\mathbf{k}\lambda} + 1\rangle,$$

для вероятности в единицу времени испускания света атомом находим

$$d\dot{W}_R = (1 + n_{\mathbf{k}\lambda}) d\dot{W}.$$

Член с единицей в правой части отвечает спонтанному излучению, которое мы обсуждали выше, а член с  $n_{\mathbf{k}\lambda}$  отвечает так называемому индуцированному излучению. Условие  $n_{\mathbf{k}\lambda} \gg 1$  определяет порог, при котором индуцированное излучение доминирует над спонтанным.

## 28.4. Лэмбовский сдвиг

Как мы знаем, энергия основного состояния осциллятора равна  $\hbar\omega/2$ . Поэтому, даже если  $n_{\mathbf{k}\lambda} = 0$ , энергия этой моды колебаний равна  $\hbar\omega_{\mathbf{k}\lambda}/2$  (так называемые нулевые колебания вакуума). Физика устроена так, что в отсутствие внешнего поля электрон не ощущает эти нулевые колебания, а во внешнем поле эти нулевые колебания приводят к сдвигу уровней энергии электрона в атоме (лэмбовский сдвиг). Для атома водорода рассмотрим вклад в лэмбовский сдвиг от нулевых колебаний с частотой  $\omega_{\mathbf{k}\lambda}$ :

$$mc^2 \gg \hbar\omega_{\mathbf{k}\lambda} \gg Ry.$$

В этой области можно не учитывать релятивистские эффекты и представить движение электрона в виде суммы  $\mathbf{r} = \mathbf{R} + \boldsymbol{\xi}$ , где низкочастотное движение  $\mathbf{R}$  связано с кулоновским полем ядра, а высокочастотное движение  $\boldsymbol{\xi}$  определяется нулевыми колебаниями вакуума, описываемыми квантованным полем  $\hat{\boldsymbol{\mathcal{E}}}$ . Разложим потенциальную энергию электрона  $U(\mathbf{r})$  по  $\boldsymbol{\xi}$ :

$$U(\mathbf{R} + \boldsymbol{\xi}) = U(\mathbf{R}) + \xi^i \frac{\partial}{\partial R^i} U(\mathbf{R}) + \frac{1}{2} \xi^i \xi^j \frac{\partial^2}{\partial R^i \partial R^j} U(\mathbf{R}) + \dots$$

Поскольку  $\boldsymbol{\xi}$  линейным образом связана с квантованным полем  $\hat{\boldsymbol{\mathcal{E}}}$ , то она является оператором  $\hat{\boldsymbol{\xi}}$  в пространстве чисел заполнения, явный вид этого оператора мы получим ниже. С учётом того, что после усреднения по вакууму  $\langle \hat{\boldsymbol{\xi}} \rangle = 0$  и  $\langle \hat{\xi}^i \hat{\xi}^j \rangle = \langle \hat{\boldsymbol{\xi}}^2 \rangle \delta^{ij}/3$ , находим поправку к потенциалу

$$\delta U(R) = \frac{1}{6} \langle \hat{\boldsymbol{\xi}}^2 \rangle \Delta U(R) = \frac{2\pi e^2}{3} \langle \hat{\boldsymbol{\xi}}^2 \rangle \delta(\mathbf{r}),$$

где мы учли, что  $\Delta 1/r = -4\pi \delta(\mathbf{r})$ . Соответствующая поправка к энергии равна

$$\delta E = \frac{2\pi e^2}{3} \langle \hat{\xi}^2 \rangle \psi^2(0).$$

Для вычисления  $\langle \hat{\xi}^2 \rangle$  рассмотрим уравнение на амплитуду колебаний  $\hat{\xi}_{\mathbf{k}\lambda}$ , соответствующую электрическому полю  $\hat{\mathcal{E}}_{\mathbf{k},\lambda}$ ,

$$m \ddot{\hat{\xi}}_{\mathbf{k}\lambda} = e \hat{\mathcal{E}}_{\mathbf{k},\lambda} = \frac{ie\omega_{\mathbf{k}}}{c} N_k \left[ \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^+ \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^* e^{i\omega_{\mathbf{k}}t - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right],$$

где  $N_k = \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega_k V}}$ , откуда находим

$$\begin{aligned} \hat{\xi}_{\mathbf{k}\lambda} &= -\frac{ieN_k}{mc\omega_k} \left[ \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} e^{-i\omega_{\mathbf{k}}t + i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^+ \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^* e^{i\omega_{\mathbf{k}}t - i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right], \\ \langle \hat{\xi}_{\mathbf{k}\lambda}^2 \rangle &= \frac{e^2 N_k^2}{(mc\omega_k)^2} \langle 0 | \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^+ \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} + \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda} \hat{a}_{\mathbf{k},\lambda}^+ | 0 \rangle = \frac{e^2 N_k^2}{(mc\omega_k)^2}. \end{aligned} \quad (287)$$

Заметим, что влиянием магнитного поля  $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k},\lambda}$  на величину  $\hat{\xi}_{\mathbf{k}\lambda}$  можно пренебречь, так как оно является релятивистским эффектом.

Окончательно получаем

$$\langle \hat{\xi}^2 \rangle = \sum_{\lambda=1,2} \int \frac{d^3k V}{(2\pi)^3} \langle \hat{\xi}_{\mathbf{k}\lambda}^2 \rangle = \frac{2\alpha\lambda_C^2}{\pi} \int_{\text{Ry}}^{mc^2} \frac{d\omega}{\omega} = \frac{2\alpha\lambda_C^2}{\pi} \ln \left( \frac{mc^2}{\text{Ry}} \right) = \frac{4\alpha\lambda_C^2}{\pi} \ln \frac{1}{\alpha}.$$

Здесь мы отбросили все константы порядка единицы по сравнению с большим логарифмом  $\ln(1/\alpha)$  (т. е., мы получили ответ с логарифмической точностью). Для поправки к энергии находим

$$\delta E_{nl} = \frac{8\alpha}{3} \lambda_C^2 \ln \left( \frac{1}{\alpha} \right) \psi_{nl}^2(0) = \frac{16\alpha^3}{3\pi n^3} \ln \left( \frac{1}{\alpha} \right) \delta_{l0} \text{Ry}. \quad (288)$$

Здесь  $n$  — главное квантовое число,  $l$  — орбитальный момент. Для водородоподобного атома с зарядовым номером  $Z$  ответ имеет вид

$$\delta E_{nl} = \frac{16\alpha^3 Z^4}{3\pi n^3} \ln \left( \frac{1}{Z\alpha} \right) \delta_{l0} \text{Ry}. \quad (289)$$

Здесь происхождение множителя  $Z^4$  следующее: один  $Z$  из потенциальной энергии и  $Z^3$  из  $\psi_{nl}^2(0)$ .

Полученный в логарифмическом приближении результат говорит о положительном сдвиге уровней энергии с  $l = 0$ . Уровни с  $l \neq 0$  тоже сдвигаются, но этот сдвиг численно меньше сдвига для  $l = 0$ , так как он не содержит большого множителя  $\ln(1/\alpha)$ . Таким образом, благодаря лэмбовскому



сдвигу происходит расщепление уровней энергии в атоме водорода с одинаковыми  $n$  и  $j$  (например,  $2s_{1/2}$  и  $2p_{1/2}$ ). Поскольку для лэмбовского сдвига  $\delta E_{nl}/Ry \sim \alpha^3 \ln(1/\alpha)$ , а для тонкой структуры  $\delta E_{FS}/Ry \sim \alpha^2$ , то лэмбовский сдвиг значительно меньше величины тонкой структуры.

## РАЗДЕЛ 29. ДВУХФОТОННЫЕ ПРОЦЕССЫ

В этом разделе мы рассмотрим двухфотонные процессы, к которым относятся процессы рассеяния света и излучение двух фотонов при переходе заряженной частицы с одного уровня на другой.

### 29.1. Рассеяние света

Вернёмся к рассмотрению временной теории возмущений. Выше мы получили уравнение для коэффициентов  $a_n$  в разложении точной волновой функции по невозмущенным волновым функциям,

$$i\hbar\dot{a}_n = \sum_m \delta H_{nm}(t) e^{i\omega_{nm}t} a_m, \quad \omega_{nm} = \frac{1}{\hbar}(E_n - E_m). \quad (290)$$

Уравнение решается при условии  $a_m(-\infty) = \delta_{mk}$ . В первом порядке теории возмущений получаем для  $n \neq k$ :

$$a_n^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t \delta H_{nk}(t') e^{i\omega_{nk}t'} dt'. \quad (291)$$

Во втором порядке теории возмущений получаем для  $n \neq k$ :

$$a_n^{(2)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum \int_{-\infty}^t \delta H_{nl}(\tau) e^{i\omega_{nl}\tau} \left[ \int_{-\infty}^{\tau} \delta H_{lk}(t') e^{i\omega_{lk}t'} dt' \right] d\tau.$$

В результате для амплитуд перехода находим

$$a_n^{(1)}(\infty) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \delta H_{nk}(t) e^{i\omega_{nk}t} dt,$$

$$a_n^{(2)}(\infty) = \frac{1}{(i\hbar)^2} \sum \int_{-\infty}^{\infty} \delta H_{nl}(\tau) e^{i\omega_{nl}\tau} \left[ \int_{-\infty}^{\tau} \delta H_{lk}(t') e^{i\omega_{lk}t'} dt' \right] d\tau.$$

В системе электронов и фотонов энергия сохраняется, поэтому будем считать, что  $\delta H_{nl}$  от времени не зависит, тогда

$$a_n^{(1)}(\infty) + a_n^{(2)}(\infty) = \frac{2\pi}{i\hbar} \delta(\omega_{nk}) \left[ \delta H_{nk} + \sum_l \frac{\delta H_{nl} \delta H_{lk}}{E_n - E_l + i0} \right].$$

Для вероятности перехода в единицу времени получаем

$$\dot{W}_{nk} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \delta H_{nk} + \sum_l \frac{\delta H_{nl} \delta H_{lk}}{E_n - E_l + i0} \right|^2 \delta(E_n - E_k) d\rho. \quad (292)$$

Здесь  $E_n$  — суммарная энергия электронов и фотонов,  $d\rho$  — плотность состояний частиц (электронов и фотонов), находящихся в непрерывном спектре

в конечном состоянии. Полученная формула является основой для описания двухфотонных процессов (упругое и неупругое рассеяние света и испускание двух фотонов), в качестве возмущения  $\delta\hat{H}$  надо брать оператор взаимодействия электрона с квантованным электромагнитным полем

$$\delta\hat{H} = -\frac{e}{m_e c}(\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hbar\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathcal{H}}) + \frac{e^2}{2m_e c^2}\hat{\mathbf{A}}^2. \quad (293)$$

В рассеянии света исчезает начальный фотон с волновым вектором  $\mathbf{k}$  и вектором поляризации  $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}$ , а конечный фотон рождается с волновым вектором  $\mathbf{k}'$  и вектором поляризации  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}$ . Для того чтобы получить амплитуду этого процесса, надо линейные по возмущению члены взять во втором порядке теории возмущений и квадратичные по возмущению члены взять в первом порядке теории возмущений.

Рассмотрим упругое рассеяние фотона на атоме водорода (электрон в конечном состоянии находится в том же состоянии  $\psi_0(\mathbf{r})$ , что и начальный электрон). Ниже мы будем проводить рассмотрение в нерелятивистском приближении, подразумевая  $\hbar\omega \ll mc^2$ . Для сечения  $d\sigma$  из правила Ферми находим

$$d\sigma = \frac{d\dot{W}}{j} = \frac{2\pi V}{\hbar c} \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega V} \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega' V} \delta(\hbar\omega' - \hbar\omega) \frac{d^3 k' V}{(2\pi)^3} \left| \frac{e^2}{m_e c^2} (\mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}) + \left( \frac{e}{m_e c} \right)^2 \sum_n \left[ \frac{\langle 0 | \mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \hat{\mathbf{p}} | n \rangle \langle n | \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \hat{\mathbf{p}} | 0 \rangle}{\epsilon_0 + \hbar\omega - \epsilon_n} + \frac{\langle 0 | \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \hat{\mathbf{p}} | n \rangle \langle n | \mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \hat{\mathbf{p}} | 0 \rangle}{\epsilon_0 - \hbar\omega' - \epsilon_n} \right] \right|^2.$$

Вклад, пропорциональный  $(\mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda})$ , возникает от последнего члена в формуле (293). Первый член в квадратных скобках отвечает амплитуде процесса, в котором вначале уничтожается начальный фотон, а затем рождается конечный фотон, т. е. энергия промежуточного состояния равна  $\epsilon_n$ . Второй член отвечает амплитуде процесса, в котором вначале рождается конечный фотон, а затем уничтожается начальный фотон. В этом случае энергия промежуточного состояния равняется  $\epsilon_n + \hbar\omega + \hbar\omega'$ . При этом энергия начального состояния равна  $\epsilon_0 + \hbar\omega$ . Представив, как всегда,  $d^3 k' = \omega'^2 d\omega' d\Omega_{\mathbf{k}'}/c^3$  и взяв интеграл по  $d\omega'$ , получаем

$$d\sigma = r_0^2 \left| (\mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}) + \frac{1}{m_e} \sum_n \left[ \frac{\langle 0 | \mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \hat{\mathbf{p}} | n \rangle \langle n | \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \hat{\mathbf{p}} | 0 \rangle}{\epsilon_0 + \hbar\omega - \epsilon_n} + \frac{\langle 0 | \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \hat{\mathbf{p}} | n \rangle \langle n | \mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \hat{\mathbf{p}} | 0 \rangle}{\epsilon_0 - \hbar\omega - \epsilon_n} \right] \right|^2 d\Omega_{\mathbf{k}'}, \quad (294)$$

где  $r_0 = e^2/(m_e c^2)$  — классический радиус электрона ( $r_0 = \alpha\lambda_C = \alpha^2 a_B$ ).

1. Рассмотрим случай  $m_e c^2 \gg \hbar\omega \gg R_y$ . Тогда

$$d\sigma = r_0^2 \left| (\mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}) \right|^2 d\Omega_{\mathbf{k}'}, \quad (295)$$

Эта формула для сечения так называемого *томсоновского рассеяния*. Суммирование по поляризациям фотона производится с помощью формулы

$$\sum_{\lambda=1,2} e_{\mathbf{k},\lambda}^{*i} e_{\mathbf{k},\lambda}^j = \delta^{ij} - n^i n^j, \quad n^i = k^i/k.$$

Просуммировав по поляризациям конечного фотона и усреднив по поляризациям начального фотона, получим

$$d\sigma = \frac{r_0^2}{2} [1 + (\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}')^2] d\Omega_{\mathbf{k}'}. \quad (296)$$

Эта формула не содержит постоянной Планка и может быть получена в рамках классической электродинамики. Формула (296) совпадает с сечением рассеяния на свободном электроны в системе покоя электрона. Полное сечение томсоновского рассеяния равно

$$\sigma = \frac{8\pi r_0^2}{3}. \quad (297)$$

Заметим, что справедливо общее утверждение (*низкоэнергетическая теорема*): если система имеет полный заряд  $Q$  и массу  $M$ , то полное сечение рассеяния фотона на этой системе в пределе  $\omega \rightarrow 0$  равно

$$\sigma = \frac{8\pi Q^4}{3M^2 c^4},$$

при этом внутренняя структура системы не важна. Таким образом, в пределе  $\omega \rightarrow 0$  сечение рассеяния на нейтральном атоме равно нулю, а на ионе с зарядом  $-ze$  ( $z$  — разница между числом протонов в ядре и числом электронов) равно

$$\sigma = \frac{8\pi z^4 e^4}{3M^2 c^4},$$

где  $M$  — масса иона.

2. Чтобы получить ответ при  $\omega \ll R_y$ , удобно переписать формулу (294) в другом виде. Используя соотношение  $\hat{\mathbf{p}}/m = (i/\hbar)[\hat{H}, \mathbf{r}]$ , после простых манипуляций получим

$$d\sigma = \frac{e^4 \omega^4}{c^4} \left| \sum \left[ \frac{\langle 0 | \mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \mathbf{r} | n \rangle \langle n | \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \mathbf{r} | 0 \rangle}{\epsilon_0 + \hbar\omega - \epsilon_n} + \frac{\langle 0 | \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \mathbf{r} | n \rangle \langle n | \mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \mathbf{r} | 0 \rangle}{\epsilon_0 - \hbar\omega - \epsilon_n} \right] \right|^2 d\Omega_{\mathbf{k}'}. \quad (298)$$

Таким образом, при  $\omega \ll \text{Ry}$  сечение упругого рассеяние света равно

$$d\sigma = \frac{\omega^4}{c^4} \left| e_{\mathbf{k}',\lambda'}^{*i} e_{\mathbf{k},\lambda}^j \alpha^{ij} \right|^2 d\Omega_{\mathbf{k}'}, \quad (299)$$

$$\alpha^{ij} = e^2 \sum_{n \neq 0} \frac{\langle 0 | r^i | n \rangle \langle n | r^j | 0 \rangle + \langle 0 | r^j | n \rangle \langle n | r^i | 0 \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_0}.$$

Напомним, что  $\alpha^{ij}$  является тензором поляризуемости исходного состояния атома, см. (248). Эта формула описывает так называемое *рэлеевское рассеяние*, которое можно оценить как

$$\sigma \sim r_0^2 \left( \frac{\hbar\omega}{\text{Ry}} \right)^4.$$

3. Аналогично случаю упругого рассеяния, легко получить формулу для сечения неупругого рассеяния (*комбинационное рассеяние*), когда в конечном состоянии электрон находится в возбуждённом состоянии  $\psi_1(\mathbf{r})$  и  $\hbar\omega' = \hbar\omega + \epsilon_0 - \epsilon_1 < \hbar\omega$ . Имеем

$$d\sigma = \frac{e^4 \omega \omega'^3}{c^4} \left| \sum_n \left[ \frac{\langle 1 | \mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \mathbf{r} | n \rangle \langle n | \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \mathbf{r} | 0 \rangle}{\epsilon_0 + \hbar\omega - \epsilon_n} + \frac{\langle 1 | \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \mathbf{r} | n \rangle \langle n | \mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \mathbf{r} | 0 \rangle}{\epsilon_0 - \hbar\omega' - \epsilon_n} \right] \right|^2 d\Omega_{\mathbf{k}'}, \quad (300)$$

Видно, что в этой формуле чётность состояний  $\psi_1(\mathbf{r})$  и  $\psi_0(\mathbf{r})$  должна быть одинакова и  $l_1 - l_0 = 0, \pm 2$ .

4. Рассмотрим для простоты упругое рассеяние света в случае, когда  $\hbar\omega \approx \epsilon_N - \epsilon_0$  (*резонансная флуоресценция*). Тогда необходимо учесть конечную ширину  $\Gamma_N$  возбуждённого уровня, т. е. сделать замену энергии  $\epsilon_N \rightarrow \epsilon_N - i\Gamma_N/2$ . Тогда, оставляя в формуле (300) только член с  $n = N$  и маленьким энергетическим знаменателем, для сечения упругого рассеяния получим

$$d\sigma_R = e^4 \omega^4 d\Omega_{\mathbf{k}'} \frac{\left| \sum_{l_z} \langle 0 | \mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \mathbf{r} | N, l_z \rangle \langle N, l_z | \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \mathbf{r} | 0 \rangle \right|^2}{c^4 [(\epsilon_0 + \hbar\omega - \epsilon_N)^2 + \Gamma_N^2/4]}. \quad (301)$$

Здесь суммирование идёт по всем проекциям момента  $l_z$  состояния с энергией  $\epsilon_N$ . Точно в резонансе

$$d\sigma_R = \frac{4e^4 \omega^4 d\Omega_{\mathbf{k}'}}{c^4 \Gamma_N^2} \left| \sum_{l_z} \langle 0 | \mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \mathbf{r} | N, l_z \rangle \langle N, l_z | \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \mathbf{r} | 0 \rangle \right|^2.$$

Таким образом,

$$\sigma_R \sim \frac{e^4 \omega^4 a_B^4}{c^4 \Gamma_N^2}.$$

Для электрического дипольного перехода

$$\Gamma_N \sim \frac{e^2 \omega^3 a_B^2}{c^3}.$$

Поэтому

$$\sigma_R \sim \frac{c^2}{\omega^2} \sim \lambda^2 \gg a_B^2 \gg r_0^2.$$

Таким образом, сечение резонансного рассеяния света является большим по сравнению с геометрическим сечением атома  $\sim a_B^2$ .

## 29.2. Излучение двух фотонов

Рассмотрим ещё один двухфотонный процесс: переход из возбуждённого состояния с волновой функцией  $\psi_1(\mathbf{r})$  в состояние  $\psi_2(\mathbf{r})$  с испусканием двух фотонов с импульсами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  и поляризациями  $\mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}$  и  $\mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}$ . Вероятность этого процесса в секунду равна

$$d\dot{W} = \frac{e^4 \omega_k^3 \omega_{k'}^3}{c^6 (2\pi)^3} \left| \sum_n \left[ \frac{\langle 2 | \mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \mathbf{r} | n \rangle \langle n | \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda}^* \cdot \mathbf{r} | 1 \rangle}{\epsilon_1 - \hbar\omega_k - \epsilon_n} + \frac{\langle 2 | \mathbf{e}_{\mathbf{k},\lambda} \cdot \mathbf{r} | n \rangle \langle n | \mathbf{e}_{\mathbf{k}',\lambda'}^* \cdot \mathbf{r} | 1 \rangle}{\epsilon_1 - \hbar\omega_{k'} - \epsilon_n} \right] \right|^2 d\omega_k d\Omega_k d\Omega_{k'}. \quad (302)$$

Здесь  $\omega_k + \omega_{k'} = \epsilon_1 - \epsilon_2$ . Рассмотрим переход  $2s \rightarrow 1s$ . Этот переход не может идти как квадрупольный переход, но может, в принципе, идти как магнитно-дипольный переход (переход с излучением одного фотона и переверотом спина электрона). Однако, так как радиальные функции  $R_{20}$  и  $R_{10}$  ортогональны, то вероятность этого однофотонного перехода сильно подавлена как  $(ka_B)^4 \sim \alpha^4$  по сравнению с обычной оценкой для магнитно-дипольного перехода. А именно

$$\dot{W}_{1\gamma} \sim \alpha^4 \times \frac{\omega^3 \mu_B^2}{\hbar c^3} \sim \alpha^9 \frac{\text{Ry}}{\hbar}.$$

Это очень маленькая величина, кроме того есть ещё маленький численный коэффициент. Заметим, что учёт релятивистских эффектов значительно меняет численный коэффициент по сравнению с полученным в нерелятивистском приближении. Точный ответ, учитывающий как разложение множителя  $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ , так и релятивистские поправки к волновым функциям (см. детали в обзоре [14]), равен

$$\dot{W}_{1\gamma} = \frac{\alpha^9}{486} \frac{\text{Ry}}{\hbar} = 2,8 \cdot 10^{-6} \text{ сек}^{-1}.$$

Поэтому переход  $2s \rightarrow 1s$  идёт с излучением двух фотонов с вероятностью:

$$\dot{W}_{2\gamma} \sim \alpha^6 \frac{\text{Ry}}{\hbar},$$

с коэффициентом  $\sim 2 \cdot 10^{-3}$  (так что  $\dot{W}_{2\gamma} \approx 8 \text{ сек}^{-1}$ ).

### 29.3. Спиновая поправка к сечению томсоновского рассеяния

Мы видели, что при  $\hbar\omega \ll mc^2$  сечение рассеяния света на покоящемся электроне не зависит от  $\hbar$  и от спина электрона. Кроме того, отдачей можно пренебречь и считать  $\omega \approx \omega'$ , так как кинетическая энергия конечного электрона равна

$$\hbar\omega - \hbar\omega' = \frac{p'^2}{2m} \sim \frac{(\hbar k)^2}{m} \sim \frac{(\hbar\omega)^2}{mc^2} \sim \hbar\omega \frac{\hbar\omega}{mc^2} \ll \hbar\omega.$$

Нас будет интересовать поправка к сечению томсоновского рассеяния, связанная со спином. Наличие этой поправки используется для измерения степени поляризации пучков и калибровки энергии частиц в электрон-позитронном коллайдере.

Вспомним релятивистскую поправку к гамильтониану, связанную со спином (мы её получали, см. (199), когда обсуждали спин-орбитальное взаимодействие):

$$\hat{H}_s = -\frac{e\hbar}{2m^2 c^2} [\hat{\mathcal{E}} \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \hat{\mathbf{s}}.$$

Чтобы получить калибровочно-инвариантное выражение, надо, как всегда, заменить  $\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}} - e\hat{\mathbf{A}}/c$ . В результате получим квадратичную по полю поправку

$$\delta\hat{H}_s = \frac{e^2\hbar}{2m^2 c^3} [\hat{\mathcal{E}} \times \hat{\mathbf{A}}] \cdot \hat{\mathbf{s}},$$

которая даёт вклад в зависящую от спина амплитуду рассеяния фотона. Таким образом, для наших целей необходимо рассмотреть гамильтониан

$$\delta\hat{H} = -\frac{e}{mc}(\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hbar\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathcal{H}}) + \frac{e^2}{2mc^2}\hat{\mathbf{A}}^2 + \frac{e^2\hbar}{2m^2 c^3} [\hat{\mathcal{E}} \times \hat{\mathbf{A}}] \cdot \hat{\mathbf{s}}.$$

Для вычисления амплитуды рассеяния фотона квадратичные по полю члены необходимо учитывать в первом порядке теории возмущений, а линейные по полю члены — во втором порядке теории возмущений. Пусть волновой вектор и поляризация начального фотона равны, соответственно,  $\mathbf{k}_1$  и  $\mathbf{e}_1$ , а волновой вектор и поляризация конечного фотона равны  $\mathbf{k}_2$  и  $\mathbf{e}_2$ . Тогда

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1 &= \mathbf{e}_1, & \mathcal{E}_1 &= ike_1, & \mathcal{H}_1 &= i[\mathbf{k}_1 \times \mathbf{e}_1] \\ \mathbf{A}_2 &= \mathbf{e}_2^*, & \mathcal{E}_2 &= -ike_2^*, & \mathcal{H}_2 &= -i[\mathbf{k}_2 \times \mathbf{e}_2^*], \end{aligned} \quad (303)$$

где  $k = \omega/c$ , а нормировочные коэффициенты  $N_k$ , см. (273), здесь опущены для краткости записи, но будут учтены в сечении. Поправка первого порядка даёт следующие матричные элементы

$$\delta H_1 = \delta H_{10} + \delta H_{1s}, \quad \delta H_{10} = \frac{e^2}{mc^2}(\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_2^*), \quad \delta H_{1s} = i \frac{e^2 \hbar \omega}{m^2 c^4}([\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2^*] \cdot \mathbf{s}).$$

Видно, что спиновая добавка имеет малость  $\hbar\omega/(mc^2)$  по сравнению с главным вкладом.

Поправка второго порядка — см. квадратичные по возмущению вклады в формуле (292) — состоит из суммы двух вкладов. Первый вклад отвечает сначала поглощению начального фотона, а затем излучению конечного фотона. При этом в промежуточном состоянии находится электрон с импульсом  $\mathbf{p} = \mathbf{k}_1$ . Второй вклад отвечает обратному процессу: сначала излучается конечный фотон, а затем поглощается начальный фотон. При этом в промежуточном состоянии находятся два фотона (начальный и конечный), а также электрон с импульсом  $\mathbf{p} = -\mathbf{k}_2$ .

Начальный электрон имеет нулевой импульс, а конечный электрон имеет импульс  $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2$ . В первом вкладе  $E_n - E_l = \hbar\omega$ , а во втором вкладе разность энергий  $E_n - E_l = \hbar\omega - 2\hbar\omega = -\hbar\omega$ . В результате зависящая от спина поправка второго порядка равна

$$\begin{aligned} \delta H_{2s} = \frac{e^2 \hbar}{m^2 c^2 \omega} \left\{ \left[ (\mathbf{A}_2 \cdot \mathbf{k}_1)(\mathcal{H}_1 \cdot \mathbf{s}) + (\mathcal{H}_2 \cdot \mathbf{s})(\mathcal{H}_1 \cdot \mathbf{s}) \right] - \right. \\ \left. - \left[ -(\mathbf{A}_1 \cdot \mathbf{k}_2)(\mathcal{H}_2 \cdot \mathbf{s}) + (\mathcal{H}_1 \cdot \mathbf{s})(\mathcal{H}_2 \cdot \mathbf{s}) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (304)$$

Подставляя потенциалы и магнитные поля начального и конечного фотонов, получаем для суммы  $\delta H_s = \delta H_{1s} + \delta H_{2s}$ :

$$\begin{aligned} \delta H_s = i \frac{e^2 \hbar \omega}{m^2 c^4} \left\{ (\mathbf{e}_2^* \cdot \mathbf{n}_1)([\mathbf{n}_1 \times \mathbf{e}_1] \cdot \mathbf{s}) - (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_2)([\mathbf{n}_2 \times \mathbf{e}_2^*] \cdot \mathbf{s}) + \right. \\ \left. + ([[\mathbf{n}_2 \times \mathbf{e}_2^*] \times [\mathbf{n}_1 \times \mathbf{e}_1]] \cdot \mathbf{s}) + ([\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2^*] \cdot \mathbf{s}) \right\}, \end{aligned} \quad (305)$$

где мы учли соотношение

$$(\mathbf{a} \cdot \mathbf{s})(\mathbf{b} \cdot \mathbf{s}) - (\mathbf{b} \cdot \mathbf{s})(\mathbf{a} \cdot \mathbf{s}) = i([\mathbf{a} \times \mathbf{b}] \cdot \mathbf{s}).$$

Если речь идёт о рассеянии на протоне, для которого магнитный момент равен  $\mu = g|e|\hbar/(2m_p c)$ , где  $g = 2,793$ , то

$$\begin{aligned} \delta H_s = i \frac{e^2 \hbar \omega}{m_p^2 c^4} \left\{ g \left[ (\mathbf{e}_2^* \cdot \mathbf{n}_1)([\mathbf{n}_1 \times \mathbf{e}_1] \cdot \mathbf{s}) - (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_2)([\mathbf{n}_2 \times \mathbf{e}_2^*] \cdot \mathbf{s}) \right] + \right. \\ \left. + g^2 \left( [[\mathbf{n}_2 \times \mathbf{e}_2^*] \times [\mathbf{n}_1 \times \mathbf{e}_1]] \cdot \mathbf{s} \right) + (2g - 1)([\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2^*] \cdot \mathbf{s}) \right\}. \end{aligned} \quad (306)$$



Поскольку

$$|\delta H_{10} + \delta H_s|^2 = |\delta H_{10}|^2 + 2\text{Re}(\delta H_{10}^* \delta H_s) + \dots$$

и  $\delta H_s$  содержит « $i$ », то линейный по  $\delta H_s$  вклад существует только для фотонов с циркулярной поляризацией, для которых вектора поляризации являются комплексными величинами. Для циркулярной поляризации выполняется следующее соотношение  $\mathbf{n} \times \mathbf{e}_\lambda = -i\lambda \mathbf{e}_\lambda$ , где  $\lambda = +1$  для правополяризованных фотонов и  $\lambda = -1$  для левополяризованных фотонов. Поэтому для циркулярной поляризации  $\delta H_s = \delta H_{1s} + \delta H_{2s}$ :

$$\begin{aligned} \delta H_s = \frac{e^2 \hbar \omega}{m_e^2 c^4} \left\{ \lambda_1 (\mathbf{e}_2^* \cdot \mathbf{n}_1) (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{s}) + \lambda_2 (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_2) (\mathbf{e}_2^* \cdot \mathbf{s}) + \right. \\ \left. + i(1 - \lambda_1 \lambda_2) ([\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2^*] \cdot \mathbf{s}) \right\}. \end{aligned} \quad (307)$$

Для протона

$$\begin{aligned} \delta H_s = \frac{e^2 \hbar \omega}{m_p^2 c^4} \left\{ g \left[ \lambda_1 (\mathbf{e}_2^* \cdot \mathbf{n}_1) (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{s}) + \lambda_2 (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{n}_2) (\mathbf{e}_2^* \cdot \mathbf{s}) \right] + \right. \\ \left. + i(2g - 1 - \lambda_1 \lambda_2 g^2) ([\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2^*] \cdot \mathbf{s}) \right\}. \end{aligned} \quad (308)$$

Для вычисления сечения удобно воспользоваться следующей формулой:

$$e_\lambda^i e_\lambda^{*j} = \frac{1}{2} (\delta^{ij} - n^i n^j - i\lambda \varepsilon^{ijl} n^l).$$

Используя эту формулу, получаем следующее выражение для сечения рассеяния циркулярно поляризованных фотонов на электроны:

$$\begin{aligned} d\sigma = \frac{r_0^2}{4} \left\{ [1 + 2\lambda_1 \lambda_2 x + x^2] + \right. \\ \left. + \frac{2\hbar\omega}{m_e c^2} (x - 1) [(\lambda_2 + x\lambda_1) (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_1) + (\lambda_1 + x\lambda_2) (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_2)] \right\} d\Omega_{\mathbf{k}_2}, \end{aligned}$$

где  $x = \mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2$ . Для протона имеем

$$\begin{aligned} d\sigma = \frac{r_{0p}^2}{4} \left\{ [1 + 2\lambda_1 \lambda_2 x + x^2] + \right. \\ \left. + \frac{2\hbar\omega}{m_p c^2} \left[ (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_1) [(2g - 1)(\lambda_1 + x\lambda_2) + g\lambda_1(x^2 - 1) - g^2(\lambda_2 + x\lambda_1)] + \right. \right. \\ \left. \left. + (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_2) [(2g - 1)(\lambda_2 + x\lambda_1) + g\lambda_2(x^2 - 1) - g^2(\lambda_1 + x\lambda_2)] \right] \right\} d\Omega_{\mathbf{k}_2}. \end{aligned}$$

Если просуммировать по спиральности  $\lambda_2$  конечных фотонов, то получим для электрона

$$d\sigma = \frac{r_0^2}{2} \left\{ (1 + x^2) + \frac{2\hbar\omega}{m_e c^2} \lambda_1 (x - 1) [x (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_1) + (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_2)] \right\} d\Omega_{\mathbf{k}_2},$$

и для протона

$$d\sigma = \frac{r_{0p}^2}{2} \left\{ (1 + x^2) + \frac{2\hbar\omega}{m_p c^2} \lambda_1 \left[ (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_1) [(2g - 1) + g(x^2 - 1) - g^2 x] + (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_2) [(2g - 1)x - g^2] \right] \right\} d\Omega_{\mathbf{k}_2}.$$

Наконец, проинтегрировав по углам вылета фотона, получаем полное сечение рассеяния фотона на электроне с учётом спиновой поправки:

$$\sigma_{tot} = \frac{8\pi r_0^2}{3} \left\{ 1 + \frac{\hbar\omega}{m_e c^2} \lambda_1 (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_1) \right\}.$$

Для протона

$$\sigma_{tot} = \frac{8\pi r_{0p}^2}{3} \left\{ 1 + \frac{\hbar\omega}{m_p c^2} (3g - 2) \lambda_1 (\mathbf{s} \cdot \mathbf{n}_1) \right\}.$$

Может возникнуть вопрос, куда делась плотность конечных состояний, соответствующая конечному электрону. Интегрирование по координате в матричном элементе даёт  $(2\pi\hbar)^3 \delta(\hbar\mathbf{k}' + \mathbf{p}' - \hbar\mathbf{k})$ . Квадрат матричного элемента даёт  $(2\pi\hbar)^3 \delta(\hbar\mathbf{k}' + \mathbf{p}' - \hbar\mathbf{k}) V$ . Умножим это выражение на плотность состояний конечного электрона  $d\rho = d^3p' V / (2\pi\hbar)^3$  и на  $1/V^2$  (по  $1/V$  на начальный и конечный электрон), после чего проинтегрируем по  $d^3p'$ . В результате получим единицу.

## РАЗДЕЛ 30. ПОКАЗАТЕЛЬ ПРЕЛОМЛЕНИЯ

Зависимость потенциала волны от координаты и времени в среде имеет вид

$$\phi(x, t) = \exp(-i\omega t + ikx) = \exp(-i\omega t + in\omega x/c),$$

где  $n$  — показатель преломления. Так как  $n = \text{Re}(n) + i\text{Im}(n)$ , то

$$|\phi(x, t)|^2 = \exp(-2\text{Im}(n)\omega x/c).$$

С другой стороны, убывание интенсивности связано с рассеянием света и поглощением:

$$|\phi(x, t)|^2 = \exp(-\mathcal{N}\sigma x),$$

где  $\mathcal{N}$  — плотность частиц в среде. Поэтому

$$2\text{Im}(n)\omega/c = \mathcal{N}\sigma.$$

Из оптической теоремы следует, что

$$\sigma = \frac{4\pi c}{\omega} \text{Im} f(0),$$

где  $f(\theta)$  — амплитуда рассеяния света на угол  $\theta$ . Поэтому

$$\text{Im}(n) = \frac{2\pi c^2 \mathcal{N}}{\omega^2} \text{Im} f(0).$$

Считая показатель преломления  $n$  и амплитуду  $f(0)$  аналитическими функциями частоты  $\omega$ , находим

$$n = C + \frac{2\pi c^2 \mathcal{N}}{\omega^2} f(0),$$

где  $C$  не зависит от  $\omega$ . Так как при  $\omega \rightarrow \infty$  показатель преломления  $n \rightarrow 1$ , то  $C = 1$ . Заметим, что если среда состоит из нескольких сортов атомов (или молекул) с соответствующими плотностями  $\mathcal{N}_i$  и амплитудами рассеяния  $f_i$ , то показатель преломления будет иметь вид

$$n = 1 + \frac{2\pi c^2}{\omega^2} \sum_i \mathcal{N}_i f_i(0).$$

## РАЗДЕЛ 31. ВРАЩАТЕЛЬНЫЕ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ СПЕКТРЫ МОЛЕКУЛ

Как мы знаем, в классической механике энергию вращения твёрдого тела можно оценить как

$$E_{rot} \sim \frac{L^2}{I},$$

где  $L$  — угловой момент и  $I$  — момент инерции. В квантовой механике мы заменяем  $L^2 \rightarrow \hbar^2 l^2$ . Момент инерции молекулы можно оценить следующим образом:  $I \sim M a_B^2$ , где  $M$  — масса ядер. Поэтому, для того чтобы возбудить вращательные степени свободы, надо затратить энергию

$$\delta E_{rot} \sim \frac{\hbar^2}{M a_B^2} \sim \frac{m_e}{M} \text{Ry}.$$

Если взять  $m_e/M \sim 10^{-4}$  и учесть, что энергия 1 эВ соответствует температуре  $1,1 \cdot 10^4 \text{K}$ , то получим, что вращательные степени свободы для лёгких ядер возбуждаются при нескольких градусах Кельвина.

Рассмотрим теперь колебательные степени свободы. Потенциал взаимодействия ядер между собой  $U(r)$  имеет минимум при  $r = R \sim a_B$ . Разложим потенциал вблизи минимума

$$U(r) = U(R) + \frac{1}{2} U''(R) (r - R)^2 + \dots$$

Таким образом, колебания молекул описываются осцилляторным потенциалом с частотой, определяемой из условия

$$M\omega^2 \sim U''(R).$$

Так как  $U''(R) \sim \text{Ry}/a_B^2$ , то

$$\hbar\omega \sim \sqrt{\frac{m_e}{M}} \text{Ry}.$$

Таким образом, колебательные степени свободы возбуждаются при температурах примерно в  $\sqrt{M/m_e} \sim 100$  раз больших, чем вращательные степени свободы.

## Список литературы

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Квантовая механика: нерелятивистская теория*. — М.: Наука, 1989.
2. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. *Квантовая электродинамика*. — М.: Наука, 1989.
3. Зелевинский В. Г. *Лекции по квантовой механике*. — Новосибирск: Сибирское университетское издательство, 2002.
4. Сербо В. Г., Хриплович И. Б. *Квантовая механика*. — Новосибирск: РИНЦ НГУ, 2010.
5. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*. — М.: Наука, 1971.
6. Мессиа А. *Квантовая механика*. — М.: 1978. Т.1, 2.
7. Мигдал А. Б. *Качественные методы в квантовой теории*. — М.: Наука, 1975.
8. Вихман Э. *Берклевский курс физики т.4, Квантовая физика*. — М.: Наука, 1986.
9. Фейнман Р., Хибс А. *Квантовая механика и интегралы по траекториям*. — М.: Мир, 1968.
10. Галицкий В. М., Карнаков Б. М., Коган В. И. *Задачи по квантовой механике*. — М.: Наука, 1992.
11. Флюгге З. *Задачи по квантовой механике*, — Москва: Мир, 1974. Т.1, 2.
12. Гольдман И. И., Кривченков В. Д. *Сборник задач по квантовой механике*. — М.: ГИТТЛ, 1957.
13. Колоколов И. В., Кузнецов Е. А., Мильштейн А. И., Подивилов Е. В., Черных А. И., Шапиро Д. А., Шапиро Е. Г. *Задачи по математическим методам физики*. — СПб.: Ленанд, 2018.
14. Zaliutdinov T. A., Solov'yev D. A., Labzowsky L. N., Plunien G. *QED theory of multiphoton transitions in atoms and ions*, Physics Reports 737 1–84 (2018).

Учебное издание

**Мильштейн** Александр Ильич,  
**Резниченко** Алексей Викторович

ЛЕКЦИИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Учебное пособие

Верстка *А. В. Резниченко*  
Обложка *Д. А. Мильштейн*  
Подготовка к печати *Т. В. Ивановой, Е. В. Неклюдовой*

Подписано в печать 20.12.2021 г.  
Формат 60 x 84 1/8. Уч.-изд. л. 24,5. Усл. печ. л. 22,8.  
Тираж 100 экз. Заказ № 267  
Издательско-полиграфический центр НГУ  
630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2.

ISBN 978-5-4437-1227-7



9 785443 712277