

Министерство образования Российской Федерации

Новосибирский государственный университет

Физический факультет

Кафедра теоретической физики

И.Ф. ГИНЗБУРГ

ВВЕДЕНИЕ В ФИЗИКУ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Часть I.

Основы квантовой механики

и

отдельные задачи физики твердого тела.

Курс лекций

НОВОСИБИРСК

2003

УДК
ВВК

И.Ф. Гинзбург. Введение в физику твердого тела. ч.1. Учебное пособие/Новосиб. гос.ун-т, Новосибирск, 2003, 218с.

Предлагаемое пособие соответствует той части годового курса для студентов отделения информатики физического факультета НГУ, которая изучается в первом семестре. Оно содержит основные разделы обычного курса квантовой механики и некоторые темы из курса "Физика твердого тела". От общего курса квантовой механики этот курс отличается меньшим набором обсуждаемых тем. Замечательный курс математики, читаемый на физическом факультете НГУ, позволил сразу взять высокий темп изложения основ теории. Необходимость как можно быстрее приступить к решению задач и работе в терминальном классе обусловила принятое построение курса, когда некоторые идейно однородные разделы разнесены по разным главам. Некоторые темы предваряются формальным решением задач в первых главах. Знакомство с этими решениями должно облегчить восприятие (сняв технические трудности длинных выкладок) при содержательном обсуждении.

При подготовке первой версии курса ("Методические указания по квантовой механике", 1992 г.) наряду с известными учебниками я использовал первую версию пособия [10]. Второе издание (1997 г.) было значительно дополнено и изменено. После этого я ещё значительно поправил текст, следуя замечаниям коллег и студентов и своему уточняющемуся пониманию некоторых вопросов. За годы преподавания изменились мои оценки иерархии важности разных разделов, часть из них излагается теперь не каждый год, они отмечены звёздочкой * перед названием. Я благодарен Г.Л. Коткину, В.Г. Сербо и И.П. Иванову за полезные замечания, существенные для конструирования курса и устранения неточностей.

Рецензент

Проф. Сербо Валерий Георгиевич

Печатается по решению кафедры теоретической физики

©Новосибирский государственный
университет, 2003

Рекомендуемая и дополнительная литература

1. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика.
2. П.В. Елютин, В.Д. Кривченков. Квантовая механика.
3. А.Мессиа. Квантовая механика.
4. Г.Липкин. Квантовая механика.
5. П.А.М.Дирак. Основы квантовой механики.
6. И.И.Гольдман, В.Д.Кривченков. Сборник задач по квантовой механике.
7. В.М.Галицкий, Б.М.Карнаков, В.И.Коган. Задачи по квантовой механике.
8. Г.Л. Коткин, В.А. Ткаченко, О.А. Ткаченко. Компьютерный практикум по квантовой механике. Изд. НГУ (1996).
9. З. Флюгге. Задачи по квантовой механике, т. 1, 2.
10. В.Г. Сербо, И.Б. Хрипович. Курс квантовой механики
11. В.Г. Зелевинский. Лекции по квантовой механике.
Сиб. универ. изд., Новосибирск (2002)

Я использовал знаки ■, ●, □, ◆ и т.п. для обозначения структурирования текста и иерархии важности структур. Читатель поймёт эту иерархию без детальных пояснений. Задачи составляют существенную часть курса. Чтобы освоить содержание курса, этот сравнительно небольшой набор задач необходимо разобрать почти полностью. Ссылки на задачи данной главы даются просто по номерам соответствующего раздела, при ссылках на задачи других глав впереди добавляется номер этой главы, так, задача 1.9 – это задача 9 к гл. 1.

Оглавление

1	ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ	8
1.1	Введение	8
1.2	Основные постулаты квантовой механики	11
1.3	Векторы состояний и волновые функции	15
1.4	Операторы	18
1.5	Оператор импульса, оператор конечного сдвига	23
1.6	Соотношение неопределённостей	24
1.7	Измерения в квантовой механике	27
1.8	Матрица плотности	30
1.9	Задачи	31
2	УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА	34
2.1	Основные факты	34
2.1.1	Эволюция состояния со временем	36
2.1.2	Плотность тока вероятности	38
2.2	Сохраняющиеся величины. Вырождение	39
2.3	Чётность	40
2.4	Одномерные задачи. Общие черты	40
2.5	Дискретный спектр	42
2.5.1	Прямоугольная потенциальная яма	43
2.5.2	Общие свойства решений одномерной задачи	44
2.6	Непрерывный спектр. Задача рассеяния	44
2.6.1	*Виртуальный уровень	46
2.6.2	Оптическая теорема в одномерном случае	47
2.7	Постановка задачи при компьютерном моделировании	47
2.8	Задачи	48
3	ГАЙЗЕНБЕРГОВСКАЯ КАРТИНА	52
3.1	Задачи	54

4	ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР	56
4.1	Осциллятор	56
4.1.1	Операторный метод	56
4.1.2	Решение с помощью разложения в ряд.	60
4.2	*Когерентные состояния	61
4.3	Задачи	64
5	ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ	66
5.1	Вариационный метод	66
5.2	Теория возмущений	68
5.2.1	Невырожденный случай	69
5.2.2	Теория возмущений при наличии вырождения	70
5.2.3	Системы с близко расположенными уровнями	73
5.3	Квазиклассическое приближение	74
5.3.1	Правила квантования Бора–Зоммерфельда	78
5.3.2	Прохождение через барьер	81
5.3.3	Квазистационарные состояния	81
5.4	Задачи	84
6	ПЕРИОДИЧЕСКОЕ ПОЛЕ	88
6.1	Основные понятия	88
6.2	Движение в периодическом поле	90
6.3	Малые колебания линейных цепочек	96
6.3.1	Цепочка одноатомных "молекул".	96
6.3.2	Цепочка двухатомных "молекул".	100
6.4	Особенности конечных цепочек	105
6.5	Квазичастицы	105
6.6	Некоторые черты трёхмерной решетки	106
6.6.1	Идеальная решетка	106
6.6.2	Обратная решетка.	108
6.7	*Эффект Мёссбауэра	110
6.8	Задачи	112
7	МОМЕНТ ИМПУЛЬСА	114
7.1	Следствия алгебры коммутаторов	114
7.2	Следствия координатной записи	118
7.3	Задачи	120

8	ЦЕНТРАЛЬНО–СИММЕТРИЧНОЕ ПОЛЕ	122
8.1	Задача двух тел. Общие свойства	122
8.2	Поле, быстро убывающее с расстоянием	125
8.3	Кулоновская задача. Атом водорода	128
8.4	Задачи	134
9	СПИН. ЧАСТИЦА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ	137
9.1	Спин	137
9.2	Движение частицы в магнитном поле	140
9.2.1	Магнитный момент заряженной частицы	140
9.2.2	Уравнение Шредингера	140
9.2.3	Электрон в однородном магнитном поле	142
9.2.4	Движение спина в магнитном поле	144
9.3	Задачи	145
10	СЛОЖЕНИЕ МОМЕНТОВ	147
10.1	Сложение моментов	147
10.2	Матричные элементы скаляров и векторов	152
10.2.1	Правила отбора	152
10.2.2	Усреднение векторного оператора.	154
10.2.3	Сдвиг уровней в магнитном поле (<i>эффект Зеемана</i>)	154
10.3	Задачи	155
11	ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ	157
11.1	Тождественность частиц	157
11.1.1	Обменное взаимодействие	159
11.1.2	Понятие о вторичном квантовании	160
11.2	Задачи	164
12	АТОМЫ И МОЛЕКУЛЫ.	165
12.1	Атом	165
12.2	Элементы описания молекулы	170
13	СИСТЕМЫ С ГАМИЛЬТониАНОМ, ЗАВИСЯЩИЙ ОТ ВРЕМЕНИ	173
13.1	Постановка вопроса и общий подход	173
13.2	Теория возмущений	175
13.3	Скачкообразное изменение гамильтониана	177
13.4	Периодическое возмущение	179

13.5	Переходы в непрерывный спектр	180
13.6	Испускание и поглощение излучения	184
13.6.1	Коэффициенты Эйнштейна	185
13.6.2	Вероятность излучения	186
13.6.3	Правила отбора для излучения	187
13.6.4	Собственная ширина уровня	188
13.7	Принципы работы лазеров	189
13.8	Задачи	191
14	РАСSEЯНИЕ	193
14.1	Постановка задачи. Общие соотношения	193
14.1.1	Амплитуда рассеяния. Сечение рассеяния	193
14.1.2	Оптическая теорема	196
14.1.3	Уравнение Шредингера в интегральной форме	198
14.2	Борновское приближение	199
14.2.1	Конечность полного сечения	201
14.2.2	Рассеяние на потенциале Юкавы	203
14.2.3	Формула Резерфорда	203
14.2.4	Атомный формфактор	204
14.3	*Фазовая теория рассеяния	205
14.3.1	Парциальные амплитуды	205
14.3.2	Фазы рассеяния.	207
14.3.3	Рассеяние при наличии неупругости	209
14.3.4	Упругое рассеяние медленных частиц	209
14.3.5	Рассеяние быстрых частиц на черном шаре.	210
14.3.6	Резонансное рассеяние	212
14.4	Задачи	213
A		215

Некоторые обозначения, основные единицы

$\hbar = 1.0546 \cdot 10^{-27}$ эрг с = $1.05 \cdot 10^{-34}$ Дж с — постоянная Планка

$e = 1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл — заряд электрона

$c = 2.9979 \cdot 10^8$ м/с — скорость света

$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$ — постоянная тонкой структуры

1 эВ — 1 электронвольт = $1.6 \cdot 10^{-19}$ Дж, 1 МэВ = 10^6 эВ

$m \equiv m_e = 9.1 \cdot 10^{-31}$ кг — масса электрона

$m_e c^2 = 0.511 \cdot 10^6$ эВ = 0.511 МэВ — энергия покоя электрона

$\mu_B = e\hbar/2m_e c = 5.8 \cdot 10^{-11}$ МэВ/Т — магнетон Бора

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

$\theta(x)$ — ступенчатая функция, т.е. $\theta(x > 0) = 1$, $\theta(x < 0) = 0$

Атомная система единиц:

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

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

Единица скорости $v_B = \alpha c$

Единица энергии $Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2} \equiv \frac{mc^2\alpha^2}{2} = 13.6$ эВ (Ридберг)

Стандартная номенклатура термов:

$L \equiv \hbar\ell$ — значение момента импульса (орбитального момента)

Значения орбитального момента ℓ обозначают буквами

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

ℓ — орбитальное квантовое число

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

m — магнитное (азимутальное) квантовое число

n_r — число нулей радиальной волновой функции,
радиальное квантовое число

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

Глава 1

ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ

1.1. Введение

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

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

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

Характерные масштабы квантовых явлений определяются, как и для фотонов, известными соотношениями $E = \hbar\omega$, $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ с постоянной Планка $\hbar = 1.0546 \cdot 10^{-27}$ эрг·с = $1.05 \cdot 10^{-34}$ Дж·с. Отличие квантовых законов от классических становится существенным когда величины с размерностью кванта действия \hbar (например, момент импульса, произведение изменения энергии на время взаимодействия, ...) настолько малы, что их можно сравнивать с постоянной Планка \hbar . Мы увидим далее, что $|\psi(x, t)|^2$ имеет смысл плотности вероятности найти частицу в точке x .

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

Наш курс направлен на решение следующих задач:

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

Простейшие объекты:

◇ *Плоская волна*

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

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

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

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

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

Здесь $\vec{u}_g = (\partial\omega/\partial\vec{k})_{\vec{k}_0} = (\partial E/\partial\vec{p})_{\vec{p}_0}$ — групповая скорость пакета.

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

■ Аналогия с электродинамикой

Чтобы уяснить идеи квантовомеханического описания, обсудим теорию электромагнитного поля $(\vec{E}(\vec{x}, t), \vec{B}(\vec{x}, t))$ на чуть-чуть новом языке. Введем шестикомпонентный объект – столбец F с компонентами $F_\alpha = (E_1, E_2, E_3, B_1, B_2, B_3)$ и строку F^\dagger с теми же компонентами, претерпевшими комплексное сопряжение, – аналоги $\psi(\vec{x}, t)$ и $\psi^*(\vec{x}, t)$. (Если используется действительное представление для полей, то строка получается из столбца простым транспонированием.) Тогда энергия поля есть

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

Точно так же импульс поля есть

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

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

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

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

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

1.2. Основные постулаты квантовой механики

Естественное обобщение этой картины для квантовой теории выглядит следующим образом.

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

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

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

◆ **Новые черты квантовой механики.** Важнейшей идеей квантовой механики (*Гайзенберг*) является разбиение входящих в вычисления объектов на два класса: *наблюдаемые и ненаблюдаемые*. Теория должна однозначно описывать наблюдаемые величины (такие как энергии излучённых частиц, потоки рассеянных частиц и т.п.), но не обязана однозначно отвечать на любезные задающему вопросы о ненаблюдаемых величинах, и в частности, о промежуточном состоянии.

Описание ненаблюдаемых величин зависит от избранного подхода. Так, волновая функция определена с точностью до несущественного фазового множителя, и в задаче о собственных функциях *мы договариваемся* выбирать чисто действительное решение. Хорошую (хотя и неполную) аналогию представляет потенциал электрического поля. Измеримая величина – разность потенциалов, поэтому потенциал определён неоднозначно – с точностью до константы, *мы договариваемся* часто принимать за нуль значение потенциала на бесконечности.

Оказалось также, что некоторые вопросы, которые кажутся естественными с классической точки зрения, лишены точного смысла в квантовой теории. Хорошо известный пример – это вопрос: *какова скорость частицы в тот момент, когда она находится в заданной точке?* Этот вопрос схож с вопросом: *какова была скорость толпы, когда Вы были в какой-то точке внутри неё?* Оба эти вопроса не имеют однозначных ответов, но на каждый из них можно получить приближенный ответ. Отличие ситуации

в квантовой механике от ситуации с толпой состоит в том, что во втором случае можно сколь угодно хорошо организовать толпу и получить ответ с любой желаемой точностью. В квантовой теории неточность ответа является фундаментальным свойством. Погрешности измерения координаты и импульса не могут быть одновременно сделаны сколь угодно малыми, они связаны *соотношением неопределённости*, известным вам из курса электродинамики и обсуждаемым подробно ниже. Это соотношение определяет *квантовый предел погрешности измерения*.

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

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

1. Состояние описывается с помощью волновой функции, **которая не является наблюдаемой величиной**. Для изолированной системы это – полное описание.
2. Предсказания квантовой механики носят статистический характер. Она предсказывает только средние значения большой серии испытаний для одинаково приготовленных систем.
3. Динамические переменные описываются с помощью операторов так, что их (**наблюдаемые**) средние значения определяются соотношением вида (1.4) $\langle A(t) \rangle = \int d^3x \psi^*(x) \hat{A} \psi(x)$.
4. **Принцип суперпозиции:** Если могут реализоваться состояния, описываемые волновыми функциями $\psi_1(\vec{x}, t)$ и $\psi_2(\vec{x}, t)$, то может реализоваться и любая их линейная комбинация $c_1\psi_1(\vec{x}, t) + c_2\psi_2(\vec{x}, t)$.
5. **Принцип соответствия:** Результаты должны переходить в классические когда величины размерности действия становятся $\gg \hbar$.
6. **Пакетность:** Волновые функции **обычно** сосредоточены в более или менее локализованных волновых пакетах (В.М. Галицкий).

Два замечания к основным постулатам. Из принципа суперпозиции следует, что уравнение, описывающее эволюцию волновой функции со вре-

менем, должно быть линейным по ψ (см. главу 2). Постулат пакетности обычно не упоминается в учебниках, он не формулируется точно.

◆ Нет универсального способа, позволяющего построить квантовый оператор, соответствующий известной классической величине. Детали $\sim \hbar$ неразличимы в классическом пределе. Часто используют правило:

Пусть классическая физическая величина известным образом определяется через координаты и импульсы частицы. Тогда оператор соответствующей квантовой величины определяется тем же соотношением с добавлением всех возможных перестановок между \hat{x} и \hat{p} . Так, классической величине px сопоставляют обычно оператор $(\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p})/2$.

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

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

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

- *Оператор координаты \hat{x}* сводится к умножению на x . Оператор какой-нибудь функции от координат $\hat{U}(x)$ сводится к умножению на $U(x)$.

Собственные значения x_0 и собственные функции $\psi_0(x)$ находятся из уравнения $\hat{x}\psi_0(x) \equiv x\psi_0(x) = x_0\psi_0(x)$. Отсюда следует, что $\psi_0(x) = \delta(x - x_0)$, а собственное значение x_0 может быть любым действительным числом.

- *Оператор импульса \hat{p} :*

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla : \quad \hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}. \quad (1.6)$$

Собственные значения p и собственные функции $\psi_p(x)$ находятся из уравнения $\hat{p}\psi_p(x) \equiv -i\hbar d\psi_p(x)/dx = p\psi_p(x)$. Отсюда получается, что собственные функции импульса имеют вид плоских волн $\psi_p(x) = \exp(ipx/\hbar)$, а собственное значение p может быть любым действительным числом.

- Вообще, если определено действие какого-то оператора \hat{G} , то функция от этого оператора $\hat{F}(G)$ определяется следующим образом:

Разложим функцию $F(g)$ в ряд Маклорена: $F(g) = \sum f_n g^n$. Тогда

$$\hat{F}(G) \stackrel{def}{=} \sum f_n (\hat{G})^n, \quad f_n = \left. \frac{1}{n!} \frac{d^n f}{dg^n} \right|_{g=0}. \quad (1.7)$$

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

- *Оператор энергии (гамильтониан):*

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

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

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

В этом отношении он сходен с оператором импульса¹.

- *Оператор момента импульса*

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

- *Оператор вероятности найти частицу вблизи точки \vec{x}_0 в объёме dV :*

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

Вероятность найти частицу в объёме dV вблизи точки x_0 есть

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

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

◇ Условие нормировки

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

¹В классической механике энергия и время так же канонически сопряжены друг другу, как и координата и импульс. Это ясно видно из записи уравнений Гамильтона–Якоби.

означает просто, что в объеме есть только одна частица.

Эта интерпретация подтверждается тем, что в соответствии с (1.4) среднее значение x равно $\langle x \rangle = \int x dw = \int x |\psi(x)|^2 dx$, и среднее значение любой функции $F(x)$ есть

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

Чтобы проиллюстрировать вероятностный характер предсказаний квантовой механики, рассмотрим дифракцию света, проходящего через пару отверстий. Один фотон, пройдя через отверстия, в конце концов провозимодействует с одним светочувствительным ионом пластинки и даст на ней тёмное пятнышко. Положение этого пятнышка нельзя предсказать точно, можно только указать, какова вероятность его появления. Точно так же, нельзя предсказать и положение пятнышка от другого фотона. Дифракционная картина возникает как сумма пятнышек от множества отдельных фотонов, распределение плотностей почернения отвечает упоминавшемуся распределению вероятностей, которое можно предсказать.

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

1.3. Векторы состояний и волновые функции

Рассмотрим Фурье-образ волновой функции $\psi_a(x)$, т.е. ее разложение по плоским волнам (1.1), описывающим состояния с определенным импульсом p .

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

При условии (1.11) $\int |\tilde{\psi}_a(p)|^2 dp = 1$. Вероятность найти частицу с импульсом p пропорциональна $|\tilde{\psi}_a(p)|^2$, $dw/dp = |\tilde{\psi}_a(p)|^2$, и для произвольной $F(p)$ среднее

$$\langle F(p) \rangle = \int \tilde{\psi}_a^*(p) F(p) \tilde{\psi}_a(p) dp.$$

В обеих функциях ψ_a и $\tilde{\psi}_a$ содержится одна и та же (полная) информация о состоянии a . Чтобы извлекать эту информацию, необходимо про

каждую из этих функций сообщать, в каком базисе она записана (в координатном или в Фурье-импульсном).

Как и в нашем трехмерном мире, в мире волновых функций надо различать вектор и его запись в различных базисах. Вектор можно задавать, не прибегая к конкретному базису; например, — \vec{a} длиной в один метр, направленный от заданной точки на Полярную звезду. В каком-нибудь избранном базисе X этот (трёхмерный) вектор записывается как тройка чисел — его проекций на оси, $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)_X$, в другом базисе Y тот же вектор определяется другой тройкой чисел $\vec{a} = (a'_1, a'_2, a'_3)_Y$. Точно так же состояние квантовой системы определяется **вектором состояния** $|\mathbf{a}\rangle$, где значок a — метка состояния, его "номер". Нередко состояния "нумеруют" значениями классических и квантовых параметров в этом состоянии, $a = (a_1, a_2, \dots)$. По традиции этот вектор называют кет - вектором. Сопряженный ему вектор называют вектором бра (вместе они образуют слово *bracket*). (Это — аналоги 6-компонентной строки F и 6-компонентного столбца F^\dagger в электродинамике.) **Набор чисел, описывающих вектор состояния в избранном базисе называют волновой функцией состояния.** Например, в предыдущем примере $\psi_a(x)$ и $\tilde{\psi}_a(p)$ — волновые функции состояния $|\psi\rangle$ в координатном и импульсном базисах соответственно.

◇ *Примеры:*

На семинарах вы решали задачу о состоянии частицы в прямоугольной яме с бесконечно высокими стенками, n -ое стационарное состояние в этой яме часто обозначают значком $|n\rangle$;

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

$|\vec{r}\rangle (\equiv |\psi_{\mathbf{r}}\rangle)$ — вектор состояния частицы, локализованной в точке \mathbf{r} .

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

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

◆ В пространстве векторов состояний можно выбрать **полный набор независимых ортонормированных векторов состояний** $|f_i\rangle$, таких что²

² Если индекс i , нумерующий вектора состояний, принимает непрерывный

$\langle f_i | f_j \rangle = \delta_{ij}$. Этот набор образует **базис** векторного пространства. Далее буква f будет "значком" выбранного базиса, а индекс i перечисляет векторы из этого базиса. Фигурные скобки в дальнейшем обозначают слово совокупность. Так, $\{|f_i\rangle\}$ обозначает совокупность всех векторов $|f_i\rangle$, то есть базис f . Часто в качестве базиса выбирают набор собственных функций оператора какой-нибудь физической величины F . В этом случае говорят о F -представлении и о волновых функциях в этом представлении.

Ясно, что можно выбирать разные базисы, и надо научиться переходить от одного базиса к другому. В квантовой механике выбор базиса называют выбором представления. Ранее обсуждались координатное (x) – и импульсное (p) – представления.

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

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

(без суммирования по значениям i).

◇ *Пример:*

В двумерном мире $\vec{a} = a_1\vec{e}_1 + a_2\vec{e}_2$. Пусть $|f_1\rangle = |\vec{e}_1\rangle$ и $|f_2\rangle = |\vec{e}_2\rangle$.

Тогда $\hat{\mathcal{P}}_1|\vec{a}\rangle = |\vec{e}_1\rangle\langle\vec{e}_1|\vec{a}\rangle = \vec{e}_1(\vec{e}_1\vec{a}) \equiv a_1|\vec{e}_1\rangle$,

т.е. \mathcal{P}_1 действует как оператор проектирования на ось 1.

Очевидно, что при суммировании по полному набору векторов состояния i получается единичный оператор (вне зависимости от конкретного базиса f)

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

■ Волновые функции.

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

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

ряд значений, то символ δ_{ij} следует заменить на δ — функцию $\delta(i - j)$, а суммы на интегралы.

Набор проекций $\langle f_i | \psi \rangle \equiv \psi(f_i)$ для всех векторов $|f_i\rangle$ из базиса $|f\rangle$ называется **волновой функцией состояния $|\psi\rangle$ в f -представлении**.

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

Преобразование волновой функции к другому представлению описывается цепочкой равенств:

$$\psi(g) = \left\{ \sum_j U_{ji}^{fg} \psi(f_j) \right\} \equiv \left\{ \sum_j \langle g_i | f_j \rangle \langle f_j | \psi \rangle \right\} = \{ \langle g_i | \psi \rangle \}, \quad (1.16)$$

$$U_{ji}^{fg} \equiv \langle g_i | f_j \rangle.$$

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

◇ При измерении величины F в состоянии $|\psi\rangle$ получается одно из собственных значений f оператора \hat{F} с вероятностью $|\psi(f)|^2$. В соответствии с этим волновую функцию $\psi(f)$ нередко называют *амплитудой вероятности*.

◇ *Пример:*

Волновая функция частицы с определенным импульсом в координатном представлении

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

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

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

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

1.4. Операторы

• Если задан способ, которым любой из векторов состояния преобразуется в другой вектор состояния $|\phi\rangle = \hat{G}|\psi\rangle$, то говорят, что задан

оператор $\hat{\mathcal{G}}$. В квантовой механике рассматриваются обычно линейные операторы

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

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

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

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

$$\begin{aligned} G_{ij}^f &= \langle f_i | \hat{\mathcal{G}} | f_j \rangle; & \hat{\mathcal{G}} | f_i \rangle &= \sum_j G_{ij}^f | f_j \rangle; \\ \hat{\mathcal{G}} &= \sum_{i,j} | f_i \rangle G_{ji}^f \langle f_j |. \end{aligned} \tag{1.17}$$

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

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

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

◆ Чтобы найти матричное представление нашего оператора в другом базисе $|g\rangle$, мы повторяем предыдущую процедуру, и с учётом (1.16) получаем

$$\hat{\mathcal{G}} = \sum_{k,l} |g_k\rangle G_{kl}^f \langle g_l| \Rightarrow G_{kl}^g = \sum_{i,j} \langle g_k | f_i \rangle G_{ij}^f \langle f_j | g_l \rangle \equiv \sum_{i,j} U_{ki}^{*fg} G_{ij}^f U_{jl}^{fg}.$$

Появившиеся здесь числа U_{ki}^{*fg} образуют матричное представление оператора преобразования $(\hat{\mathcal{U}}^{fg})^\dagger$, получающееся из матрицы преобразования $\hat{\mathcal{U}}^{fg}$ транспонированием и комплексным сопряжением. Говорят, что

оператор $(\hat{U}^{fg})^\dagger$ эрмитово сопряжён оператору \hat{U} . Если $|g_k\rangle$ и $|f_i\rangle$ – ортонормированные базисы, то

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

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

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

◇ *Примеры:*

• Матрица оператора импульса в \hat{p} – представлении имеет вид $\langle \vec{p}' | \hat{p} | \vec{p} \rangle = \vec{p}' \delta(\vec{p}' - \vec{p})$; в координатном представлении

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

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

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

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

• Аналогично, для оператора координаты мы имеем:

$$\langle \vec{r}' | \hat{r} | \vec{r} \rangle = \vec{r}' \delta(\vec{r}' - \vec{r}); \quad \langle \vec{p}' | \hat{r} | \vec{p} \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \delta(\vec{p}' - \vec{p}),$$

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

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

Видно, что в этих представлениях матрицы операторов \hat{r} и \hat{p} пропорциональны δ -функции или ее производной: $G_{ff'} = G_s(f) \delta(f - f')$.

■ Эрмитовы операторы.

Назовем оператор \hat{B} эрмитово сопряженным к оператору \hat{A} ($\hat{B} = \hat{A}^\dagger$), если для любых двух функций ψ_1 и ψ_2 справедливо соотношение $\int (\hat{B}\psi_1)^* \psi_2 dx = \int \psi_1^* \hat{A}\psi_2 dx$. (В матричной записи оператор \hat{A}^\dagger получается из \hat{A} посредством транспонирования и комплексного сопряжения,). *Оператор называется эрмитовым (или самосопряженным) если $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, т.е. если оператор совпадает со своим эрмитово сопряженным, или в (1.17) $A_{ji} = A_{ij}^*$.* (Сравните с эрмитовыми матрицами в алгебре).

Среднее значение физической величины A по любому состоянию действительно, т.е. $\langle A \rangle = \int \psi^* \cdot \hat{A}\psi dx = \langle A \rangle^* = \int \psi^* \cdot \hat{A}^+\psi dx$. Поскольку ψ – произвольная функция, то это означает, что $\hat{A} = \hat{A}^+$, т.е.

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

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

■ Некоммутативность операторов, коммутаторы

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

Пример:

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

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

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

▼ **Коммутатор $i\hat{C}$ операторов \hat{A} и \hat{B}** определяется соотношением:

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

■ Собственные значения и собственные векторы. II.

Собственные значения λ оператора \hat{A} определяются из решения задачи о собственных значениях, т.е. из уравнения (1.5) $\hat{A}|\psi_\lambda\rangle = \lambda|\psi_\lambda\rangle$. Если одному собственному значению λ соответствует несколько независимых собственных функций, то говорят, что это значение λ соответствует **вырожденному** состоянию.

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

В случае вырождения можно выбрать собственные функции ортогональными. Поэтому всегда можно иметь в виду в качестве базиса ортонормированную систему собственных функций какого-нибудь оператора $\int \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn}$.

- Система собственных функций $\psi_n(x)$ эрмитова оператора полна:

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

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

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

◇ Полнота системы собственных функций эрмитова оператора \hat{G} позволяет дать новое определение функции от оператора:

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

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

■ Одновременная измеримость.

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

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

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

Но поскольку это равенство имеет место для произвольного вектора $|\psi\rangle$, то в этом случае операторы \hat{A} и \hat{B} коммутируют, $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

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

вырождения можно выбрать такие линейные комбинации $\sum c_i |\psi_{ia}\rangle$, которые будут собственными функциями \hat{B} .

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

■ **Полный набор наблюдаемых.**

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

▼ Все эти величины одновременно измеримы.

▼ В состоянии, где все эти величины имеют определённые значения, никакая другая величина (не являющаяся их функцией) не может иметь определённого значения.

1.5. Оператор импульса, оператор конечного сдвига

Покажем теперь на примере, как получаются выражения для операторов некоторых физических величин.

Зададим достаточно гладкую функцию $f(x)$, и определим оператор \hat{T}_a сдвига координат на величину a соотношением:

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

Разложим сдвинутую функцию в ряд Тейлора:

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

Таким образом, можно записать

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

Оператор импульса

Если система обладает трансляционной инвариантностью, т.е. ее свойства не меняются при сдвиге, то импульс системы сохраняется. И наоборот, можно определить импульс как величину, которая сохраняется в силу трансляционной инвариантности. Трансляционная инвариантность включает в себя и инвариантность относительно конечного сдвига. Это значит, что оператор импульса \hat{p} коммутирует с оператором конечного

сдвига, $[\hat{p}, \hat{T}_a] = 0$. Поэтому естественно определить оператор импульса как $A \cdot d/dx$ и отыскать коэффициент A .

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

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

Интегрирование по частям дает: $A = -A^*$. Поэтому число A — чисто мнимое, и $\hat{p}_x = -i\hbar d/dx$ (1.6). (Множитель \hbar получается из размерности, а знак — следует из принципа соответствия, в согласии со стандартной записью для плоской волны в виде $\exp[-i(\omega t - kx)]$.)

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

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

1.6. Соотношение неопределённостей

В курсе электродинамики были получены соотношения неопределённостей и сделаны некоторые оценки на их основе. Здесь используется более аккуратный подход. В нём, в частности, становится ясно, что соотношения неопределённостей электродинамики формально являются банальным фактом теории преобразований Фурье. Точно так же, в квантовой теории соотношения неопределённостей являются следствием того, что физические величины описываются операторами, и эти операторы вообще говоря не коммутируют.

Пусть коммутатор эрмитовых операторов \hat{A} и \hat{B} есть $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}$. Определим дисперсию величины A в состоянии $|n\rangle$: $\Delta A = \sqrt{\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)^2 \rangle}$. Рассматривая следствия некоммутативности операторов для этого состояния, без ограничения общности примем, что $\langle n | \hat{A} | n \rangle = \langle n | \hat{B} | n \rangle = 0$. Тогда $\Delta A = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle}$.

Образуем теперь состояние $|m\rangle = (\alpha \hat{A} + i\hat{B})|n\rangle$ и вычислим величину

$$\begin{aligned} \langle m | m \rangle &\equiv J(\alpha) = \langle n | (\alpha \hat{A} - i\hat{B})(\alpha \hat{A} + i\hat{B}) | n \rangle = \\ \langle n | \alpha^2 \hat{A}^2 + i\alpha(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}) + \hat{B}^2 | n \rangle &= \alpha^2 (\Delta A)^2 - \alpha \langle C \rangle + (\Delta B)^2. \end{aligned} \quad (1.25)$$

По определению, величина $J(\alpha) \equiv \langle m|m \rangle$ неотрицательна. Но в этом случае дискриминант получившейся квадратичной формы по α (1.25) не может быть положительным, т.е. должно быть

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

Итак, получилось неравенство, следующее из некоммутативности операторов — **соотношение неопределенностей**

$$[A, B] = iC \Rightarrow \Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{|\langle C \rangle|}{2}. \quad (1.26)$$

В частности,

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \Rightarrow \Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar/2. \quad (1.27)$$

◆ Эти соотношения вполне подобны тем, которые обсуждались для колебаний и волн в других курсах. Мы только выяснили здесь, каков точный смысл обсуждавшихся там оценок. Физический смысл этих соотношений подробно обсуждался в курсе электродинамики. Большинство этих выводов с очевидным изменением терминологии переносится и на квантовую механику.

В частности, соотношение (1.26) означает, что в состоянии с разбросом ΔA в величине A разброс ΔB в величине B не меньше, чем $|\langle C \rangle|/(2\Delta A)$. Не может существовать состояний с лучшей локализацией. В частности, если приготовлено состояние, в котором частица локализована в небольшой области, то она быстро делокализуется за счет разброса в импульсах. Например, если электрон локализовать в объеме радиуса 10^{-8} см, то через секунду он почти равновероятно может быть найден в области радиусом 1500 км (а неопределенность положения макроскопического объекта — шарика от пинг-понга — увеличится на 1% за миллиарды лет). В частности, для квантовой частицы не существует понятия траектории, можно указать лишь "трубку неопределённостей", внутри которой движется частица (расплывающийся волновой пакет). Согласно простейшей трактовке, невозможно одновременно измерить импульс и координату с высокой точностью. и соотношение неопределённостей ограничивает погрешность этих измерений.

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

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq \hbar/2. \quad (1.28)$$

Оно означает в частности, что при измерении, длящемся время t , невозможно измерить энергию с точностью, лучшей чем \hbar/t . Полезно обсудить в этой связи переход системы из состояния с энергией E_i в состояние с энергией E_f под действием света с такой частотой ω , что выполняется закон сохранения энергии $\hbar\omega = E_f - E_i$. Если воздействие света на систему продолжается в течение (хотя и большого) конечного времени T , то сигнал не монохроматичен, спектр его частот размазан по интервалу шириной $\hbar/2T$, и с той же погрешностью нарушается закон сохранения энергии (см. подробный пример в гл. 13). Поэтому, в частности, в любых реальных переходах закон сохранения энергии не выполняется точно. (Разумеется, это не противоречит возможности существования систем со строго определённой энергией.) Вообще, справедливость закона сохранения энергии в любом случае ограничена значением $\hbar T_{un}$, где $T_{un} \sim 5 \times 10^{17}$ с. – время жизни Вселенной. Это существенно для явлений микромира, но для явлений окружающей нас жизни характерная величина нарушений чудовищно мала. Так, при наблюдении в течение 0.001 сек отклонения от закона сохранения энергии составляют $\sim 10^{-31}$ Дж! В большинстве классических задач подобная неопределённость превышает погрешность описания изолированной системы в пренебрежении взаимодействием с окружением.

Для нестабильной частицы с временем жизни τ ($|\psi|^2 \propto e^{-t/\tau}$) соотношение неопределённостей (1.28) означает, что энергия этой частицы не может быть определена с точностью, лучшей $\hbar/2\tau$, эта величина определяет *ширину* соответствующего уровня энергии (см. подробнее разд. 5.3.3).

◇ *Оценки с помощью соотношения неопределённостей.*

- Оценим энергию основного состояния гармонического осциллятора:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \rightarrow$$

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

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

- Для энергии основного состояния электрона в атоме водорода.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}.$$

получаются не точные неравенства, а только оценки:

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

Здесь мы предположили по аналогии с компонентами векторов (несуществующее) перестановочное соотношение для длин векторов $[r, p] = i\hbar$ и сочли, что $\langle 1/r \rangle \approx 1/\Delta r$. Последнее неравенство получено с помощью той же минимизации, что и выше. Неудивительно, что и ответ совпадает с точным только по порядку величины (отличается вчетверо).

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

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

Однако, концепция дополненности имеет значительно более общее значение.

Так, не существует ответа на вопрос, каково мгновенное значение частоты Вашего пульса сегодня в 11 часов 12 минут 37.555 секунд. Здесь дополнительными являются понятия частоты пульса и времени, необходимого для его измерения. (Обычно мы имеем дело со средним значением, но и оно зависит от предыстории).

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

1.7. Измерения в квантовой механике

Измерением в квантовой механике называют процесс взаимодействия

между квантовым объектом и классическим объектом (*прибором*), происходящий независимо от наблюдателя (*Н. Бор*)³.

При измерениях любых физических величин измерительный прибор вносит изменения в наблюдаемую систему. Например, при измерении электрического поля, вызываемого каким-то распределением зарядов, само это распределение меняется под воздействием заряда, используемого для измерений.

В классической физике считают, что можно (по крайней мере, в принципе) так уменьшить влияние измерительного прибора, чтобы сделать пренебрежимо малыми изменения, вносимые этим прибором в измеряемую систему (в нашем случае – сделать величину измерительного заряда сколь угодно малой).

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

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

◇ Вообще, при измерении какой-либо физической величины A система переходит из измеряемого состояния $|\Psi\rangle$ в другое состояние $|\psi_{A_i}\rangle$ (происходит *редукция волнового пакета* в состояние $|\psi_{A_i}\rangle$), которое задаётся прибором, но обычно не является даже собственным вектором оператора \hat{A} . Предсказать однозначно полученное значение A_i и состо-

³ Подобная независимость измерения от наблюдателя может не реализовываться в описании некоторых явлений жизни общества (*Дж. Сорос*).

яние $|\psi_{A_i}\rangle$ нельзя. Можно лишь указать вероятность этого результата измерения $|\langle\Psi|\psi_{A_i}\rangle|^2$. Более того, повторное измерение той же величины даст вообще говоря другое значение A_j и другой вектор состояния $|\psi_{A_j}\rangle$, поскольку полученные состояния не были собственными состояниями оператора \hat{A} . Разумеется, если повторить это измерение с копией нашей системы, получатся скорее всего другие состояния, с другими значениями A_i и A_j . В соответствии с постулатами квантовой теории, среднее значение величины A есть $\sum A_i |\langle\Psi|\psi_{A_i}\rangle|^2$. При повторном измерении меняется и это среднее значение.

◇ Разумеется, последовательные измерения координаты частицы, выполненные с конечной точностью, покажут близкие значения x_i , но при стремлении к нулю интервала времени между двумя измерениями Δt не существует определённого предела $\Delta x/\Delta t$, имеющего смысл скорости. Вообще, **в квантовой механике не существует понятия траектории частицы**. Это понятие можно определить только приближенно, наименьшая неопределённость в этом понятии задаётся соотношением неопределённостей.

"Частица не имеет в действительности ни определённого импульса, ни определённого положения в пространстве; описание с помощью ψ -функции является в принципе полным описанием. Точное местоположение частицы, которое я получаю в результате его измерения, не может быть интерпретировано как местоположение частицы до измерения. Точная локализация, которая обнаруживается при измерении, будет проявляться только через неизбежное (не несущественное) воздействие измерения. Результат измерения зависит не только от реального положения частицы, но также и от принципиально неполного знания механизма измерения" (А. Эйнштейн). В этом высказывании Эйнштейна содержится неточность, состоящая в употреблении понятия *реальное положение частицы*, которое в действительности не определено, как он сам напоминает в начале этого высказывания.

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

Основой схемы является передача по линии связи сигнала в одноквантовой форме. Ниже мы будем говорить о передаче сигнала в виде последовательности фотонов одинаковой частоты, но имеющих разные циркулярные поляризации так, что например сигнал 1001101 передаётся последовательностью фотонов *лпплллл*, где *л* отвечает левополяризован-

ным фотонам, а n – правополяризованным. Далее используется тот факт, что любое наблюдение (со считыванием данных или простое запоминание) – измерение – вносит неконтролируемое изменение в этот сигнал.

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

□ Кодирование основного сообщения совершается обычным образом по какой-нибудь известной книге, например, по Библии. Секретным является выбор отрывка, используемого как база для кодирования. Поэтому либо этот отрывок должен быть согласован заранее, либо сообщение должно указывать положение этого отрывка (адрес). Разумеется, только второй способ может обеспечить секретность.

□ По линии передаётся серия сигналов с адресами отрывков. Получатель отправляет отправителю контрольные суммы полученных сигналов (и может быть ещё чуть более сложные контрольные характеристики). У всех прочитанных на пути сообщений контрольные суммы не сходятся.

□ Отправитель сообщает получателю номер сообщения с правильной контрольной суммой, т.е. адрес кодирующего отрывка, и отправляет соответствующим образом закодированное основное сообщение.

1.8. Матрица плотности

Понятие волновой функции определяется только для изолированной системы. Если система не изолирована, естественно стартовать с описания полной системы, волновая функция которой зависит как от координат частиц системы x , так и от переменных окружающих частиц (среды) X , $\psi \equiv \psi(x, X)$. Среднее значение физической величины G , определенной только через переменные нашей системы x , есть

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

Угловые скобки и значок T означают усреднение по состояниям окружающей среды, функция $G(x, x')$ определяет матричное представление оператора $\hat{G}(x)$ (1.17). Интегрирование по переменным X и усреднение по ним одинаковы для всех операторов, действующих только на переменные x , что приводит нас к понятию **матрицы плотности** (*Л.Д. Ландау*)

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

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

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

1.9. Задачи

1. Найти $\psi(x, t)$, если $A(k) = A_0 \exp \left[-\frac{(k - k_0)^2}{4(\Delta k)^2} \right]$, для частиц с законом дисперсии $\omega = ck$ (электромагнитные волны в пустоте) и $\omega = \hbar k^2/2m$ (нерелятивистская свободная частица массы m). Сравнить с $\psi(x, 0)$. Вычислить размер пакета при $t = 1$ сек. для электрона, первоначально локализованного в размере атома водорода, и для шарика от пинг-понга.
2. Для частицы в потенциальном ящике

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

1. Найти уровни энергии E_n и волновые функции ψ_n
2. Оценить энергию основного состояния E_1 для
 - частицы массы $m=1$ г в ящике с $a \sim 1$ см;
 - электрона в ящике с $a \sim 10^{-8}$ см;
 - молекулы H_2 в ящике с $a \sim 1$ см; найти n , соответствующее энергии $E_n \approx kT$, где $T=300$ К; оценить $(E_{n+1} - E_n)/E_n$ для этой энергии.
3. Сравнить классическую $\frac{dw}{dx} = \frac{2}{v(x)T}$ и квантовую $\frac{dw}{dx} = |\psi_n(x)|^2$ плотности вероятности при $n=1$ и $n \gg 1$. То же для dw/dp .
4. Найти вероятность пребывания частицы в области $0 < x < a/3$.
5. Найти число энергетических уровней в интервале $(E, E + dE)$ при достаточно больших E .
6. Найти силу давления, оказываемую частицей на стенку.
7. Найти работу, которую следует совершить для медленного сжатия ямы в ν раз.
8. Для двумерного потенциального ящика

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

- Найти уровни энергии E_n и волновые функции ψ_n .
Отдельно рассмотреть случай квадратного ящика.
 - Решить ту же задачу для трехмерного ящика.
 - Для обоих указанных ящиков найти число энергетических уровней в интервале $(E, E + dE)$ при достаточно больших E .
9. Найти собственные функции операторов \hat{x} и \hat{p} в x - и p -представлениях.
 10. Найти коммутаторы $[p_x, x]$, $[p_x, z]$.
 11. Найти соотношение неопределенностей для Δx и ΔT , для ΔT и $\Delta U(x)$, где $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$.
 12. Для частицы, находящейся в состоянии $\psi(x, y, z)$, найти вероятность того, что ее координата x и импульс p одновременно расположены в пределах $(x_1 < x < x_2)$ и $(p_1 < p_x < p_2)$ или $(p_1 < p_y < p_2)$.
 13. Показать, что $[e^{i\vec{k}\vec{r}}, \hat{p}] = \vec{k}e^{i\vec{k}\vec{r}}$. Найти $[e^{i\vec{k}\vec{r}}, \hat{p}^2]$.
 14. Покажите, что коммутатор двух эрмитовых операторов — антиэрмитов. Он становится эрмитовым после деления на i .
 15. Покажите, что для произвольного оператора \hat{A} среднее по любому состоянию $\langle \psi | |\hat{A}|^2 | \psi \rangle$ положительно. В частности, для эрмитова оператора \hat{B} положительно среднее $\langle \psi | \hat{B}^2 | \psi \rangle$.
 16. Покажите, что

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]. \quad (1.31)$$

17. Покажите, что имеет место тождество Якоби:

$$[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{C}] + [[\hat{B}, \hat{C}], \hat{A}] + [[\hat{C}, \hat{A}], \hat{B}] = 0. \quad (1.32)$$

18. Найти $[\hat{B}, \hat{C}]$, в случае, когда $[\hat{C}, \hat{A}] = \lambda\hat{A}$ и $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$.
19. Покажите, что для коммутаторов между компонентами оператора момента импульса (1.9) и компонентами вектора A_i при имеют место перестановочные соотношения (e_{ijk} — известный антисимметричный по всем индексам тензор, $e_{123} = 1$)

$$[L_i, A_j] = ie_{ijk}A_k \quad (A_j = L_j, r_j \text{ или } p_j). \quad (1.33)$$

По аналогии с (1.6) можно ожидать, что $\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$ (φ — угол вращения вокруг оси z). Исходя из этого, объясните, что означают полученные равенства (1.33) для любого вектора \hat{A} при $i = 3$.

20. Оцените наименьшие погрешности, с которыми можно определить скорости электрона и протона, локализованных в области размером 1 мкм, 10^{-8} см.

21. Покажите, что энергия основного состояния атома водорода $E_0 = -\frac{me^4}{2\hbar^2} = -\frac{mc^2\alpha^2}{2} = -13,6$ эВ (для этого возьмите соотношение неопределенностей в виде $\Delta p_r \Delta r \geq \hbar$).
22. Оценить с помощью соотношения неопределенностей энергию основного состояния и неопределенность в положении по вертикали нейтрона в гравитационном поле Земли в этом состоянии. (Ответ довести до чисел.)
23. Найти распределение по импульсам в основном состоянии атома водорода $\psi(r) = (\pi a^3)^{-1/2} e^{-r/a}$.
24. Покажите, что при $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-\hat{A}} = e^{\hat{R}}, \text{ где } R = e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}}; \quad (1.34)$$

$$e^{\hat{A}} \hat{B} e^{-\hat{A}} = \hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}] + \frac{1}{2} [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \dots \quad (1.35)$$

$$e^{\eta(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\eta\hat{A}} e^{\eta\hat{B}} e^{-\eta^2[\hat{A},\hat{B}]/2}. \quad (1.36)$$

25. Доказать соотношение

$$e^{\hat{L}} \hat{A} e^{-\hat{L}} = \hat{A} + \frac{1}{1!} [\hat{L}, \hat{A}] + \frac{1}{2!} [\hat{L}, [\hat{L}, \hat{A}]] + \dots \quad (1.37)$$

Указание: Построить оператор $\hat{A}(\eta) = e^{\eta\hat{L}} \hat{A} e^{-\eta\hat{L}}$ и найти для него дифференциальное уравнение.

Глава 2

УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА

2.1. Основные факты

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

Чтобы догадаться, как выглядит этот оператор \hat{D} , вспомним выражение для стандартной плоской волны (1.1), $\psi = Ce^{i(px-Et)/\hbar}$. Для такой функции дифференцирование по времени дает собственное значение оператора \hat{D} , равное $E/i\hbar$. Это — основание для догадки, что и в общем случае $\hat{D} = \hat{H}/i\hbar$, где \hat{H} — оператор Гамильтона (гамильтониан)(1.8). Это — пример использования принципа соответствия¹. В сущности, утверждение, что $\hat{D} = -i\hat{H}/\hbar$, представляет еще один постулат квантовой механики, но постулат "второго сорта" как все получаемые из принципа соответствия определения операторов физических величин. Итак,

уравнение для эволюции волновой функции со временем — уравнение Шредингера записывают в виде:

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

Это уравнение сохраняет свой вид вне зависимости от используемого

¹ Для знакомых с элементами аналитической механики приведу "более возвышенный" аргумент: В классической механике $p = \partial S/\partial x$, $H = -\partial S/\partial t$ (S — действие). Если в квантовой механике $p \Rightarrow -i\hbar\partial/\partial x = \hat{p}$, то следует ожидать, что $E \Rightarrow i\hbar\partial/\partial t \rightarrow \hat{H}$.

представления. Иными словами, это — уравнение для векторов состояния. Его свойства:

- Уравнение Шредингера линейно: если $\psi_1(\vec{r}, t)$ и $\psi_2(\vec{r}, t)$ — решения уравнения Шредингера то $c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ также является решением (принцип суперпозиции).
- Уравнение Шредингера — уравнение первого порядка по времени; поэтому $\psi(\vec{r}, t)$ в любой момент времени полностью определяется, если известна $\psi(\vec{r}, t_0)$ в некоторый момент t_0 .

Далее мы долго ограничиваемся случаем, когда гамильтониан \hat{H} не зависит от времени явно.

■ Рассмотрим **стационарные решения уравнения Шредингера**, т.е. решения, для которых плотность вероятности $|\psi_n(\vec{r}, t)|^2$ не меняется со временем. Вся зависимость такого решения от времени должна сводиться к некоторому фазовому множителю $\psi_n(\vec{r}, t) = \psi_n(\vec{r})e^{i\phi_n(t)}$. Подставим это соотношение в уравнение Шредингера (2.1) и используем метод разделения переменных. При этом наше уравнение разбивается на два, которые удобно записать в виде:

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

Величина E_n появляется как параметр разделения переменных, не зависящий от \vec{r} и t . В соответствии с принципом соответствия мы отождествляем эту величину с энергией системы в состоянии ψ_n .

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

уравнением Шредингера для стационарных состояний:

$$\hat{H}\psi_n(\vec{r}) \equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi_n(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi_n(\vec{r}) = E_n\psi_n(\vec{r}), \quad (2.2)$$

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

Решения уравнения (2.2) ищутся в классе функций, квадратично интегрируемых вместе с первой производной. Они образуют базис *энергетического представления*.

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

◇ Если одно собственное значение E отвечает нескольким различным волновым функциям ψ_α , т.е. $\hat{H}\psi_\alpha = E\psi_\alpha$ при $\alpha = 1, \dots, k$. то говорят, что

состояние с энергией E вырождено (k -кратно). Ясно, что любая линейная комбинация функций ψ_α также описывает стационарное состояние с энергией E . При описании системы с вырождением любой из наборов функций ψ_α можно рассматривать как базис. Во многих случаях вырождение связано с существованием какой-то симметрии системы, состояния ψ_α переходят друг в друга при преобразованиях этой симметрии.

■ Нормировки волновой функции

Мы выбираем начало отсчета потенциальной энергии так, чтобы учесть исчезновение взаимодействия на больших расстояниях²: $U(\vec{r}) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. В соответствии с этим, постановки соответствующих краевых задач и нормировки волновой функции существенно различаются для случаев $E < 0$ и $E > 0$. Это различие соответствует двум разным типам классического движения.

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

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

$$\langle p' | p \rangle = \delta(p - p'). \quad (2.3)$$

2.1.1. Эволюция состояния со временем

В общем случае эволюция волновой функции определяется следующим образом. Разложим волновую функцию начального состояния $\psi(\vec{r}, 0)$ по собственным функциям $\psi_n(\vec{r})$ гамильтониана системы \hat{H} : $\psi(\vec{r}, 0) = \sum c_n \psi_n(\vec{r})$. Тогда со временем каждая из этих компонент эволюциониру-

²Это условие нарушено для гармонического осциллятора, бесконечно глубокой прямоугольной ямы, ... В таких задачах всегда предполагается фактически, что рост потенциала останавливается при очень больших $U(r)$, и наше условие удовлетворяется после замены $U(r) \rightarrow U(r) - U(\infty)$.

ет по своему закону (2.2), и в итоге мы имеем

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum c_n e^{-iE_n t/\hbar} \psi_n(\vec{r}), \quad \left(c_n = \int \psi_n^*(\vec{r}) \psi(r, 0) d^3r \right). \quad (2.4)$$

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

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

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, 0) |\psi(0)\rangle. \quad (2.5a)$$

Он даёт компактную запись (2.4). При этом уравнение Шредингера даёт уравнение для оператора эволюции

$$i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{H}(t) \hat{U}. \quad (2.5b)$$

Если гамильтониан не меняется со временем, т.е. $[\hat{H}(t), \hat{H}(t')] = 0$ (как это имеет место в большинстве рассматриваемых в этом курсе задач), то из (2.5b) получается простое выражение для оператора эволюции

$$\hat{U}(t, 0) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \quad (\hat{U}(0) = 1). \quad (2.5c)$$

Из эрмитовости гамильтониана следует, что оператор \hat{U} – *унитарный*:

$$\hat{U}^{-1}(t, 0) \equiv \hat{U}(-t, 0) = e^{i\hat{H}t/\hbar} = \hat{U}(t, 0)^+. \quad (2.5d)$$

Действие оператора эволюции на стационарные состояния описывается соотношением $\hat{U}|n\rangle = \exp(-iE_n t/\hbar)|n\rangle$.

Если гамильтониан зависит от времени, то выражение для оператора эволюции сложнее.

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

$$\hat{S} = \hat{U}(\infty, -\infty). \quad (2.6)$$

■ Нетрудно убедиться, что эволюцию волновой функции (2.4) можно описать и с помощью функции Грина G , которая, в сущности представляет собой запись оператора эволюции в координатном представлении:

$$\psi(\vec{r}, t) = \int G(\vec{r}, \vec{r}', t) \psi(\vec{r}', 0) d^3 r' : G = \sum_n \psi_n(\vec{r}) \psi_n^*(\vec{r}') e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (2.7a)$$

Функция Грина удовлетворяет уравнению с начальным условием:

$$i\hbar \partial G / \partial t = \hat{H}G, \quad G(\vec{r}, \vec{r}', 0) = \sum_n \psi_n(\vec{r}) \psi_n^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (2.7b)$$

2.1.2. Плотность тока вероятности

Рассмотрим изменение плотности вероятности $\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2$ со временем:

$$\partial \rho / \partial t = \psi^* \partial \psi / \partial t + (\partial \psi^* / \partial t) \psi.$$

Подставим сюда вместо производных от ψ и ψ^* их выражения, получающиеся из уравнения Шредингера (2.1). В итоге получается

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m} \left[\psi^* \vec{\nabla}^2 \psi - (\vec{\nabla}^2 \psi^*) \psi \right].$$

Теперь преобразуем выражение в квадратных скобках, добавив и вычитая слагаемое $\vec{\nabla} \psi^* \vec{\nabla} \psi$. При этом правая часть оказывается дивергенцией некоторого вектора \vec{j} (*плотности тока (вероятности)*), и наше равенство принимает вид уравнения непрерывности:

$$\partial \rho / \partial t = -\vec{\nabla} \vec{j}; \quad \vec{j} = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^* (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi^*) \psi]. \quad (2.8)$$

Выделяя амплитуду и фазу волновой функции, имеем

$$\psi = \sqrt{\rho} e^{i\varphi} \Rightarrow \vec{j} = \hbar \rho \vec{\nabla} \varphi / m. \quad (2.9)$$

Итак, ток вероятности направлен вдоль градиента фазы волновой функции. Именно в этом состоит физический смысл фазы.

◇ В частности, для плоской волны (1.1)

$$\psi(\mathbf{x}) = A e^{i \frac{(\mathbf{p}\mathbf{x} - Et)}{\hbar}} \Rightarrow \mathbf{j} = |A|^2 \frac{\mathbf{p}}{m}. \quad (2.10a)$$

Поэтому далее мы (если это не оговорено специально) будем считать стандартным выражение для плоской волны, нормированной на поток:

$$\psi(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{m}{p}} e^{i \frac{(\mathbf{p}\mathbf{x} - Et)}{\hbar}}. \quad (2.10b)$$

Это соответствует прохождению одной частицы в секунду через площадку единичной площади, перпендикулярную вектору \mathbf{p} .

2.2. Сохраняющиеся величины. Вырождение

Рассмотрим оператор какой-нибудь физической величины A , и вычислим производную по времени от ее среднего значения по некоторому состоянию $|\psi\rangle$ (домножив его на $i\hbar$):

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

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

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

Вывод:

Если $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$ и операторы \hat{A} и \hat{H} коммутируют, то $d\langle A \rangle/dt = 0$, т.е. величина $\langle A \rangle$ не меняется со временем. Тогда \hat{A} – оператор сохраняющейся величины.

В этом случае стационарные состояния можно выбрать так, чтобы они одновременно были собственными состояниями и оператора \hat{A} и гамильтониана. При этом говорят также, что величина A и энергия *одновременно измеримы* (см. подробнее ниже).

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

$$\left[\begin{array}{l} [\hat{A}, \hat{H}] = 0, \\ [\hat{B}, \hat{H}] = 0, \\ [\hat{A}, \hat{B}] \neq 0 \end{array} \right. \Rightarrow \text{стационарные состояния вырождены.} \quad (2.11)$$

Заметим, что сохранение какой-нибудь величины A означает обычно существование некоторой симметрии. Иными словами, наличие симметрии ведёт обычно к вырождению стационарных состояний. Кратность вырождения увеличивается при добавлении дополнительных симметрий.

2.3. Чётность

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

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

Собственное значение оператора отражения называется **чётностью P** . Иначе говоря, $\hat{\mathcal{P}}\psi(x) = P\psi(x)$.

Найдем возможные собственные значения оператора $\hat{\mathcal{P}}$. Т.к. $\hat{\mathcal{P}}\psi(x) = \psi(-x)$, то $\hat{\mathcal{P}}^2\psi(x) = \psi(x)$. В то же время $\hat{\mathcal{P}}^2\psi(x) = P^2\psi(x)$, т.е. $P^2 = 1$. Поэтому

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

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

Чётность — специфически квантовое понятие. Она не имеет классического аналога, поскольку чётные и нечётные состояния неразличимы для классической величины — вероятности.

2.4. Одномерные задачи. Общие черты

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

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

◇ *Задачи на полубесконечной прямой*, возникающие при решении задачи о радиальном движении в центрально-симметричном поле (см. дальше). Чтобы описать движение только при $r > 0$, в предыдущую задачу вводится потенциал, обращающийся в ∞ при $r < 0$. Соответственно, граничные условия для этой задачи включают требование $\psi(x = 0) = 0$.

■ **Свойства решений.**

Уравнение Шредингера (2.2) – линейное дифференциальное уравнение второго порядка. Оно имеет два независимых решения ψ_1 и ψ_2 . Определитель Вронского – *вронскиан* – для этих решений не зависит от координат:

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

(Легко проверить, что в силу уравнения Шредингера $dW/dx = 0$.)

◆ **Для линейно независимых решений $W \neq 0$.**

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

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

Иными словами, если $U(x)$ не обращается в бесконечность, то из конечности волновой функции следует непрерывность ее производной и непрерывность самой функции:

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

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

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

Тогда вблизи этой точки решение можно представить в виде

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

Из условий непрерывности (2.14) следует, что $D = B$, $C = Ak/\varkappa$, т.е. при переходе через точку a решения преобразуются по закону (**правила сшивки**):

$$\begin{aligned} A \sin[k(x - a)] &\rightarrow A \frac{k}{\varkappa} \text{sh}[\varkappa(x - a)], \\ B \cos[k(x - a)] &\rightarrow B \text{ch}[\varkappa(x - a)]. \end{aligned} \quad (2.15)$$

(Нетрудно проверить, что вронскиан при сшивке не изменился.)

◇ При описании некоторых явлений удобно использовать модельные потенциалы с бесконечными скачками в $U(x)$ (например, для случая бесконечного потенциального ящика). При этом второе из условий (2.14) может нарушиться. В частности, для $U(x) = -G\delta(x - a)$ из уравнения Шредингера (2.2) получается

$$\begin{aligned}\psi'(a + \epsilon) - \psi'(a - \epsilon) &= \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\epsilon}^{a+\epsilon} dx [-G\delta(x - a) - E]\psi(x) \Rightarrow \\ \psi'(a + 0) - \psi'(a - 0) &= -k_0\psi(a). \\ k_0 &= \frac{2mG}{\hbar^2} \quad (U(x) = -G\delta(x - a)).\end{aligned}\tag{2.16}$$

Следует не путать условия сшивки (2.14)–(2.16) с граничными условиями, которые обсуждаются ниже.

2.5. Дискретный спектр

■ Постановка задачи.

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

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

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

■ Теорема о вириале

Пусть $|n\rangle$ – стационарное состояние дискретного спектра (финитное движение), т.е. собственное состояние гамильтониана $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$. Тогда для любого сохраняющегося оператора \hat{A} имеем $\langle n|[\hat{H}, \hat{A}]|n\rangle = \langle n|\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}|n\rangle \equiv (E_n - E_n)\langle n|\hat{A}|n\rangle = 0$. В частности, для $\hat{A} = \hat{p}\hat{r}$ с учётом (1.31) и соотношения $\hat{H} = T + U(r)$, $T = \hat{p}^2/2m$ получаем

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

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

$$2\langle n|T|n\rangle = \langle n|\vec{r}\vec{\nabla}U|n\rangle.\tag{2.18}$$

◇ В частности, для гармонического осциллятора имеем

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

◇ Точно так же для атома водорода

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

Разумеется, теорема о вириале справедлива для любого финитного движения (не только одномерного).

2.5.1. Прямоугольная потенциальная яма

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

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

Уравнение Шредингера имеет вид

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

Заметим, что $\hat{H}(-x) = \hat{H}(x)$, т.е. чётность сохраняется. Поэтому мы рассмотрим отдельно чётные и нечётные решения.

Чётные решения имеют вид

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

Записав теперь условия непрерывности для $\psi'(x)$ и $\psi(x)$ в точке $x = a$ и поделив одно равенство на другое, получаем уравнение

$$\operatorname{tg} ka = \frac{\kappa}{k} = \sqrt{\frac{k_0^2}{k^2} - 1} \quad \left(k_0^2 = \frac{2mV}{\hbar^2} \right). \quad (2.20a)$$

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

от параметра $k_0 a$. Легко видеть, что это уравнение имеет решение при сколь угодно малом значении $k_0 a$.

Нечётные решения имеют вид

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

Тем же путём, как и для чётных решений, в этом случае получается уравнение на собственные значения

$$\operatorname{tg} ka = -k/\kappa. \quad (2.20b)$$

Свойства решений разберите, следуя задаче 6 в конце главы. Заметим, что фактическим параметром задачи является величина $k_0 a$.

2.5.2. Общие свойства решений одномерной задачи

Рассмотренный пример позволяет легко понять общие черты решения любой одномерной задачи.

- *Дискретные уровни в одномерной задаче невырождены.*

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

$$\begin{aligned} \frac{\psi_1''}{\psi_1} &= \frac{2m}{\hbar^2}(U - E) = \frac{\psi_2''}{\psi_2} \rightarrow \psi_1''\psi_2 - \psi_2''\psi_1 = 0 \\ &\Rightarrow \frac{d}{dx}(\psi_1'\psi_2 - \psi_2'\psi_1) = 0. \end{aligned}$$

В силу граничного условия (2.17), отсюда следует $\psi_1'\psi_2 - \psi_2'\psi_1 = 0$. Поэтому $\psi_1 = C\psi_2$, т.е. решения совпадают.

- **Осцилляционная теорема:** Волновая функция дискретного спектра $\psi_n(x)$, соответствующая $n + 1$ -му по величине собственному значению E_n , обращается в нуль n раз при конечных x (примеры — потенциальный ящик, осциллятор). Между двумя любыми нулями n -го состояния лежит ровно один нуль $n + 1$ -го уровня.

2.6. Непрерывный спектр. Задача рассеяния

■ **Постановка задачи.** Как уже говорилось, при $E > 0$ частица не локализуется в конечной области пространства, условие нормировки (1.11) не может выполняться и ограничения на значения энергии не возникают. Мы имеем дело с *непрерывным спектром*. Здесь ставится

одномерная задача рассеяния:

Слева падает поток частиц $N e^{ikx}$. Из-за взаимодействия с рассеивателем возникает рассеянная волна $iN f(k, k') e^{ik'x}$ с $k' = -k$ при $x \rightarrow -\infty$ (отраженная волна) и $k' = k$ при $x \rightarrow \infty$ (прошедшая волна). Требуется определить амплитуду рассеяния $f(k, k')$. Иными словами, граничное условие для уравнения Шредингера выбирается в виде

$$\psi \rightarrow e^{-iEt/\hbar} \begin{cases} N (e^{ikx} + i f(k, -k) e^{-ikx}) & \text{при } x \rightarrow -\infty, \\ N (e^{ikx} + i f(k, k) e^{ikx}) & \text{при } x \rightarrow \infty, \end{cases} \quad (2.21)$$

и требуется найти величины $f(k, k')$.

Мы выбираем $N = \sqrt{m/(\hbar k)}$, что отвечает нормировке на поток. Обозначения для амплитуды рассеяния выбраны так³, чтобы соответствовать стандартным обозначениям трёхмерной задачи, гл. 14. В частности, $iN f(k, -k) e^{-ikx}$ и $iN f(k, k) e^{ikx}$ вместе представляют собой волны, расходящиеся от рассеивателя, а $\sigma = |f(k, k)|^2 + |f(k, -k)|^2$ – величину полного потока, идущего от рассеивателя. В трёхмерной задаче подобную величину называют *полным сечением рассеяния*.

• Начнем вычисления с **нефизического случая**, когда потенциал не обращается в нуль на ∞ ("ступенька")

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

Тогда нормировки потоков слева и справа от ступеньки различны, и взамен (2.21) уравнение Шредингера следует решать с граничными условиями

$$\begin{aligned} \psi \rightarrow e^{-iEt/\hbar} \begin{cases} N (e^{ikx} + i f(k, -k) e^{-ikx}) & \text{при } x \rightarrow -\infty, \\ N_1 (e^{ik_1 x} + i f(k, k_1) e^{ik_1 x}) & \text{при } x \rightarrow \infty, \end{cases} \\ k = \sqrt{2mE/\hbar^2}, \quad k_0 = \sqrt{2mV/\hbar^2}, \quad k_1 = \sqrt{k^2 + k_0^2}; \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$N = \sqrt{m/(\hbar k)}, \quad N_1 = \sqrt{m/(\hbar k_1)}.$$

Решение уравнение Шредингера даёт

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

Мы выбрали единичную плотность тока падающей волны, плотность тока отражённой волны есть $|f(k, -k)|^2$, а плотность тока прошедшей

³ Нередко можно встретить единое обозначение для амплитуды прошедшей волны, например, $B \equiv 1 + i f(k, k)$ и соответственно $A \equiv i f(k, -k)$.

волны $j_{\text{пр}} = |1 + if(k, k)|^2$. Нетрудно убедиться, что коэффициенты прохождения $T = |1 + if(k, k)|^2$ и отражения $R = |f(k, -k)|^2$ связаны законом сохранения потока числа частиц $R + T = 1$.

▽ Оптический аналог – отражение света при нормальном падении на границу раздела (справа – вакуум, слева – стекло), в оптике волновой вектор $k = 2\pi/\lambda = \omega n/c$ (n – показатель преломления).

◇ При $0 > E > -V$ асимптотика при $x \rightarrow -\infty$ изменяется, $\psi \rightarrow (B/\sqrt{\kappa})e^{\kappa x}$, $\kappa^2 = 2m(V - E)/\hbar^2$, оптический аналог – полное внутреннее отражение при движении из $+\infty$.

• Для физически осмысленного случая, когда потенциальная энергия обращается в нуль при $x \rightarrow \pm\infty$, асимптотическое поведение волновой функции на больших расстояниях даётся граничными условиями (2.21).

Для **прямоугольной потенциальной ямы** (2.19) простые вычисления (две сшивки) дают в обозначениях (2.22) (задача 21)

$$1 + if(k, k) = \frac{e^{-2ika}}{\cos 2k_1 a - i \frac{k^2 + k_1^2}{2kk_1} \sin 2k_1 a}. \quad (2.23)$$

Прямое вычисление показывает, что коэффициент прохождения обращается в бесконечность при мнимых значениях k , отвечающих положениям уровней (2.20), $E = -(\hbar k)^2/(2m)$.

2.6.1. *Виртуальный уровень

Некоторые состояния непрерывного спектра похожи на стационарные. Это можно увидеть, рассматривая решение (2.23) для очень глубокой ямы $k_0 a \gg 1$ в случае $ka \gg 1$, $k_1 \gg k$.

Коэффициент прохождения $|1 + if(k, k)|^2$ принимает максимальное значение 1 при тех значениях энергии E_n , когда $2k_1(E_n)a \approx \pi n$. Расстояние между соседними максимумами этой величины в шкале волновых чисел есть $\delta k_1 = (n + 1)\pi/2a - n\pi/2a = \pi/2a$, что даёт для энергетической шкалы расстояние между максимумами коэффициента прохождения $\delta E = 2k_1 \delta k_1 \hbar^2/2ma = \pi \hbar^2 k_1/(2ma)$. С учетом равенства $k_1 \delta k_1 = m \delta E/\hbar^2$ разложение величины $(1 + if(k, k))^{-1}$ по $\Delta E = E - E_n$

вблизи n -го максимума даёт:

$$\begin{aligned}
 (1 + if(k, k))^{-1} &= e^{i\phi} \left[1 - i \frac{k^2 + k_1^2}{2kk_1} \cdot 2a\Delta k_1 \Delta E \right] \approx e^{i\phi} \left[1 - i \frac{ma\Delta E}{k\hbar^2} \right] \\
 \Rightarrow 1 + if(k, k) &= \frac{i\Gamma/2e^{-i\phi}}{E - E_n + i\Gamma/2}, \quad \Gamma = \frac{2k\hbar^2}{ma}, \quad (2.24) \\
 \phi &= \pi n + 2ka.
 \end{aligned}$$

Итак, поведение кривых вблизи каждого максимума описывается независимыми уравнениями обычного резонансного вида, и ширина каждого из максимумов Γ мала по сравнению с расстоянием между ними ($\Gamma/\delta E = 4k/(\pi k_1)$). Это – **виртуальные уровни**. В нашем примере их положения совпадают с уровнями энергии бесконечно глубокой потенциальной ямы той же ширины с дном на уровне $-V$. Уровни хорошо определены при $k \ll k_0$, т.е. $E \ll V$. При этой энергии рассеиватель становится прозрачным, т.к. последовательное отражение волны от двух границ даёт волну с той же фазой, частица надолго задерживается над ямой, и отражения не возникает.

2.6.2. Оптическая теорема в одномерном случае

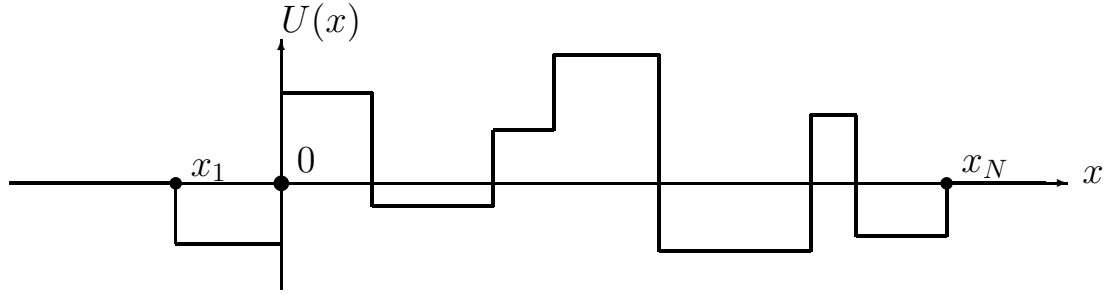
В процессе рассеяния вероятность сохраняется, т.е. сумма прошедшего и рассеянного потоков частиц совпадает с первоначальным. Это равенство составляет содержание **оптической теоремы**

$$\begin{aligned}
 |1 + if(k, k)|^2 + |f(k, -k)|^2 &= 1 \\
 \Rightarrow 2Imf(k, k) &= \sigma \equiv \sum_{k'=\pm k} |f(k, k')|^2. \quad (2.25)
 \end{aligned}$$

В трёхмерном случае соответствующее соотношение (14.11) получается менее тривиальным образом.

2.7. Постановка задачи при компьютерном моделировании

В терминальном классе многие физические ситуации моделируются для одномерной системы последовательностью прямоугольных стенок и барьеров вида, изображенного на рисунке.



Моделирование осуществляется следующим образом.

При некоторой энергии E в каждой из областей с $V = \text{const} = V_i$ вычисляется величина $k_i = \sqrt{2m(E - V_i)}/\hbar$ или $\kappa_i = \sqrt{2m(V_i - E)}/\hbar$ (та из них, которая действительна). В этой области решение имеет вид $C_{1i}e^{ik_ix} + C_{2i}e^{-ik_ix}$ или $B_{1i}e^{-\kappa_ix} + B_{2i}e^{\kappa_ix}$.

Затем в самой левой зоне (при $x < x_1$) выбирается решение в виде волны, спадающей налево (при $x \rightarrow -\infty$), $e^{\kappa x}$ для $E < 0$ или уходящая в левую сторону e^{-ikx} для $E > 0$. Далее, с помощью условий сшивки (2.14) на первом скачке потенциала определяются коэффициенты $C_i(B_i)$ для второй области. Затем решения подводятся ко второму скачку, и опять с помощью условий сшивки (2.14) определяются коэффициенты $C(B)$ в третьей области. Таким способом находят в конце концов коэффициенты $C(B)$ в крайней правой области ($x > x_N$).

Если $E < 0$, то в этой правой области решение имеет вид $B_1(E)e^{-\kappa x} + B_2(E)e^{\kappa x}$. Далее строится зависимость величины коэффициента при растущей экспоненте B_2 от E . Собственные значения – уровни энергии – отвечают точкам, где $B_2 = 0$ (т.е. в них выполняется граничное условие (2.17) – $\psi(x) \rightarrow 0$ при $x \rightarrow \infty$).

После этого (если нужно) проводится нормировка волновой функции с помощью условия (1.11).

Если $E > 0$, то в самой правой области (при $x > x_N$) получившееся решение имеет вид $B_1e^{ikx} + B_2e^{-ikx}$. Это решение нормируется на волну, падающую справа e^{-ikx} . Для этого полученная волновая функция делится на C_2 . При этом коэффициент прохождения $T = |C_2|^{-2}$, коэффициент отражения $R = |C_1/C_2|^2$.

2.8. Задачи

1. Как изменится $\psi(x, t)$ при изменении начала отсчета потенциальной энергии на величину ΔV ?

2. Как изменится $\psi(x, t)$ при переходе в систему отсчета, движущуюся относительно первоначальной со скоростью \vec{v} ?
3. Найти плотность тока и среднее значение импульса частицы в состоянии $\psi(x) = e^{-ax^2 + i\beta x}$.
4. Вычислить оператор $e^{a\hat{P}}$, где a – число, а \hat{P} – оператор отражения.
5. В бесконечно глубоком прямоугольном потенциальном ящике найти $\psi(x, t)$, если $\psi(x, 0) = A(x^2 - a^2)$.
6. Для частицы в прямоугольной потенциальной яме конечной глубины на бесконечной прямой (2.19) покажите, что
 1. Уровни для нечетных решений получаются из уравнения (2.20b).
 2. Все уровни можно найти из уравнения $\sin(\pi n/2 - ka) = \kappa/k_0$.
 3. Для всех состояний $A = \sqrt{\kappa/(1 + \kappa a)}$.
 4. Чётные и нечётные уровни чередуются.
 5. Всегда существует хотя бы один уровень.
 6. В мелкой яме, $V \ll \hbar^2/ma^2$, существует лишь одно связанное состояние с энергией $E_0 = -\hbar^2\kappa_0^2/2m$ и волновой функцией $\psi_0(x) \approx \sqrt{\kappa_0}e^{-\kappa_0|x|}$, $\kappa_0 = 2aVm/\hbar^2$. Оцените Δx и Δp .
 7. Потенциал $U = -G\delta(x)$ соответствует яме с $G = 2aV \rightarrow const$ при $a \rightarrow 0$. Установите соответствие с мелкой ямой ($V \rightarrow 0$).
 8. Для связанного состояния в поле $U = -G\delta(x)$ выразить средние значения кинетической и потенциальной энергии через энергию уровня.

9. Определить уровни энергии для потенциала

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

При какой минимальной глубине в яме появляется уровень? два уровня?

10. Для частицы в трёхмерном кубическом ящике размером a , с непроницаемыми стенками, найти уровни энергии, волновые функции, плотность числа состояний при $E \gg \hbar^2/(2ma^2)$.
11. Частица массы m находится в стационарном состоянии $\psi(x)$ в поле $U(x)$. Найти энергию состояния E и $U(x)$ для случаев:
 - а) $\psi(x) = Ae^{-\alpha x^2}$; б) $\psi(x) = \begin{cases} xe^{-\beta x} & \text{при } x > 0, \\ 0 & \text{при } x < 0. \end{cases}$
12. Для свободного движения найти общие собственные функции гамильтониана и оператора инверсии \mathcal{P} .

13. Для барьера произвольной формы доказать равенство коэффициентов прохождения "справа" и "слева".
14. Для поля в виде двух падающих ступенек, соответствующего просветлённой оптике, найдите условие прозрачности.
15. Найти уровни энергии и волновые функции для ямы, прижатой к началу координат на полубесконечной прямой (радиальная задача для центрально-симметричной прямоугольной ямы):

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

При какой наименьшей глубине ямы появляется первый уровень? Сравните решения с решениями для ямы на бесконечной прямой.

16. Частица находится в поле $U(x) = -G\delta(x)$.
 - а) Найти уровни энергии и волновые функции.
 - б) Найти коэффициент прохождения $T(E)$.
 - в) При $t = 0$ волновая функция имеет вид $\psi = \kappa^{-1/2}e^{-\kappa|x|}$ с κ , не зависящим от G . Найти вероятность того, что при $t \rightarrow \infty$ частица окажется в связанном состоянии.
 - г) Найти уровни энергии и волновые функции, решая задачу в импульсном представлении.
17. Частица находится в связанном состоянии в "движущейся яме" $U(x, t) = -G\delta(x - vt)$. В момент $t = 0$ яма останавливается, при $t > 0$ имеем $U(x, t) = -G\delta(x)$. Найти вероятность того, что частица останется в связанном состоянии.
18. Рассмотреть частицу в поле $U = -G\delta(x - b)$ на полубесконечной прямой ($U(x < 0) = \infty$).
 - а) Найти уровни энергии и волновые функции.
 - б) При $t = 0$ волновая функция имеет вид $\psi = \kappa^{-1/2}e^{-\kappa|x|}$. Найти вероятность того, что при $t \rightarrow \infty$ частица останется в связанном состоянии.
19. Для частицы в поле $U(x) = -\varepsilon G\delta(x + b) - G\delta(x - b)$, $\varepsilon = \pm 1$
 - а) ($\varepsilon = 1$) Найти уровни энергии и волновые функции. Исследовать зависимость от b . Найти силы, действующие на каждую из ям в разных состояниях.
 - б) ($\varepsilon = 1$) Определить $\psi(x, t)$, если при $t < 0$ между ямами была непроницаемая перегородка и частица находилась в стационарном связанном состоянии вблизи левой ямы.

с) ($\varepsilon = 1$) Исследовать зависимость от энергии коэффициента прохождения и амплитуды волновой функции вблизи начала координат. Рассмотреть случаи $G > 0$ и $G < 0$.

д) ($\varepsilon = -1$) При каком b исчезают связанные состояния?

20. Найти коэффициенты прохождения и отражения в поле

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

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

21. Для частицы в поле прямоугольной потенциальной ямы (барьера) ширины $2a$ и глубины V (2.19) получите выражение (2.23) для амплитуды прошедшей волны и коэффициент прохождения $T = |1 + if(k, k)|^2$. Покажите, что при $E < 0$ полюса $f(k, k)$ соответствуют связанным состояниям в той же яме (2.20). Для барьера особо рассмотрите случай $\kappa a \gg 1$. Для барьера упростите выражение $T(E)$ в случае $|T(E)| \ll 1$.

22. Пучок электронов с импульсом p_z проходит между двумя плоскостями кристалла конечной длины. Найти угловое распределение электронов на выходе, если их взаимодействие с кристаллическими плоскостями описывается потенциалом:

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

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

23. Найти энергии и волновые функции связанных состояний в поле $U(x) = -G[\delta(x - a) + \delta(x) + \delta(x + a)]$.

При каких a число уровней уменьшается до двух, до одного?

Найти зависимость коэффициента прохождения от энергии.

Отдельно рассмотреть случай $mGa \gg \hbar^2$.

24. Взаимодействие протона и нейтрона, приводящее к образованию дейтона можно аппроксимировать прямоугольной потенциальной ямой с шириной 1,2 фм и глубиной U . Энергия связи дейтона составляет очень малую величину 2,2 МэВ. Определить U .

Глава 3

ГАЙЗЕНБЕРГОВСКАЯ КАРТИНА

В нашем построении содержался важный произвол: мы фиксировали некоторые определения операторов и рассматривали волновые функции, зависящие от времени. Это — **шредингеровская картина**. В этой картине операторы \hat{r} и $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ не зависят от t ; среднее значение физической величины A есть $\langle A(t) \rangle = \int \psi^*(r, t) \hat{A}(\vec{r}, \vec{p}, t) \psi(r, t) d^3r$, где $\psi(\vec{r}, t)$ удовлетворяет уравнению Шредингера (2.1).

Но физический смысл имеют только средние (1.4). Фиксируя определение оператора в начальный момент времени, мы не обязаны сохранять его далее. Наша задача — иметь самосогласованную систему определений, правильно описывающих средние значения физических величин (1.4).

То же самое среднее $\langle A(t) \rangle$ можно представить в **гайзенберговской картине**, где вся зависимость от времени переносится на операторы \hat{A}_H , а векторы состояний фиксируются в начальный момент, "замораживаются". Переход к этой картине осуществляется с помощью оператора эволюции системы во времени $\hat{U}(t, 0)$ (2.5)

$$\langle A(t) \rangle = \langle \psi(\vec{r}, 0) | \hat{A}_H(t) | \psi(\vec{r}, 0) \rangle, \quad \hat{A}_H(t) \equiv \hat{U}^{-1}(t, 0) \hat{A} \hat{U}(t, 0). \quad (3.1)$$

Оператор \hat{A}_H — это оператор физической величины A в гайзенберговской картине.

Если гамильтониан системы не зависит от времени явно и оператор \hat{A} коммутирует с гамильтонианом (т.е. сохраняется), то и \hat{U} коммутирует с \hat{A} . Поэтому в таком случае $\hat{A}_H = \hat{A}$. В частности, при этом $\hat{H}_H(t) = \hat{H}$.

Далее в этой главе операторы и векторы состояния в гайзенберговской картине мы снабжаем индексом H , а в использовавшейся ранее (шредингеровской) — индексом S , причем

$$|\psi_H\rangle = |\psi_S(t = 0)\rangle. \quad (3.2)$$

Повторим, что наше определение означает, что $\langle A \rangle_H = \langle A \rangle_S$. Поэтому при записи средних значок H или S не нужен.

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

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

Раскроем производную в левой части равенства:

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

Используя для $d\psi_S/dt$ уравнение Шредингера (2.1), получим с учетом (3.2) уравнение движения для оператора в гайзенберговской картине:

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

$$i\hbar \frac{d\hat{A}_H}{dt} = i\hbar \cdot \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} + [\hat{A}_H, \hat{H}]. \quad (3.3)$$

(Это получается и прямо из определения A_H , если принять, что $\frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} = U^{-1} \frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t} U$.)

Таким образом, если оператор \hat{A} коммутирует с гамильтонианом и не зависит явно от времени, то его средние не меняются со временем — физическая величина A сохраняется. Отметим, что при этом $\hat{A}_H = \hat{A}_S$, т. е. при переходе от шредингеровской картины к гайзенберговской выражение для такого оператора не меняется.

Заметим ещё, что в классической механике $\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} - \{H, A\}$, где $\{H, A\}$ — скобки Пуассона. Это означает, что $\frac{1}{i\hbar}[A, H]$ — квантовый аналог скобок Пуассона.

◇ *Пример:*

Для свободного движения $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$, $[\hat{H}, \hat{p}] = 0$, и состояния с определенным импульсом стационарны.

■ Сложные системы. Представление взаимодействия

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

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}. \quad (3.4)$$

Пусть далее \hat{U}_0 – оператор эволюции, отвечающий "свободному" гамильтониану, и оператор физической величины A в представлении свободного гамильтониана \hat{H}_0 есть \hat{A}_I

$$\hat{U}_0 = e^{-\hat{H}_0 t / \hbar}, \quad \hat{A}_I(t) = \hat{U}_0^{-1}(t) \hat{A} \hat{U}_0(t). \quad (3.5)$$

В представлении взаимодействия зависимость операторов от времени определяется "свободным" гамильтонианом (3.5), как для гайзенберговской картины, а временная зависимость, обусловленная взаимодействием, сохраняется за волновыми векторами. Уравнение Шредингера в представлении взаимодействия (13.4) выписано в 13 главе.

Стартуя от описания системы \hat{H}_0 , оператор эволюции системы в целом вообще говоря нельзя записать в форме, подобной (2.5с), поскольку операторы \hat{H}_0 и $\hat{V}(t)$ могут не коммутировать. Однако, если взаимодействие V достаточно слабое, то используя оператор взаимодействия в представлении свободного гамильтониана (3.5) можно записать первые члены ряда для оператора эволюции в виде

$$\hat{U}(t, 0) \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{V}_I(t') dt' + \dots \quad (3.6)$$

3.1. Задачи

1. Найти операторы координаты и импульса в зависимости от времени:
 - а) для свободной частицы;
 - б) для частицы в однородном поле $U(x) = -Fx$;
 - в) Покажите, что для гармонического осциллятора ($U(x) = m\omega^2 x^2 / 2$):

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

2. Найти средние $\langle x(t) \rangle$, $\langle p(t) \rangle$, $\langle \Delta x^2(t) \rangle$, $\langle \Delta p^2(t) \rangle$ в перечисленных выше случаях.
3. Найти средние $\langle x(t) \rangle$, $\langle p(t) \rangle$, $\langle \Delta x^2(t) \rangle$, $\langle \Delta p^2(t) \rangle$ для свободной частицы в состоянии, описываемом волновой функцией:

$$\psi(x, 0) = A \exp[ip_0 x / \hbar - (x - x_0)^2 / 4a^2].$$

4. Покажите, что

$$\frac{d\hat{r}_H}{dt} = \frac{\hat{p}_H}{m}, \quad \frac{d\hat{p}_H}{dt} = -\vec{\nabla}U. \quad (3.7)$$

Получите отсюда *теорему Эренфеста* – квантовую форму второго закона Ньютона:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \vec{r} \rangle = -\langle \vec{\nabla}U \rangle. \quad (3.8)$$

5. Для электрона в атоме водорода найти $d\hat{r}/dt$ и $d^2\hat{r}/dt^2$.
6. Найти перестановочные соотношения операторов координат и импульса в разные моменты времени $[x(t), p(t')]$; $[x(t), x(t')]$ для случаев свободного движения, однородного поля и гармонического осциллятора.
То же для произвольного поля $U(x)$ при малых $|t' - t|$.
7. Найти перестановочные соотношения операторов кинетической энергии осциллятора, взятых в разные моменты времени. Записать соответствующее соотношение неопределённостей.
8. Для заряженной частицы в электромагнитном поле

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

а) коммутатор $[\hat{v}_x, \hat{v}_y]$;

б) ускорение \hat{a} ;

в) плотность тока \vec{j} .

Для случая однородного магнитного поля $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ показать, что операторы $\hat{x}_c = \hat{x} + \hat{v}_y / \omega_B$, $\hat{y}_c = \hat{y} - \hat{v}_x / \omega_B$ соответствуют сохраняющимся величинам ($\omega_B = eB/mc$ – частота движения в магнитном поле). Найти коммутатор $[\hat{x}_c, \hat{y}_c]$.

Глава 4

ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

4.1. Осциллятор

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

Его гамильтониан имеет вид

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

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

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

$$\hat{H} = \hbar\omega\hat{\varepsilon}, \quad \hat{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\hat{p}}{p_0} \right)^2 + \left(\frac{\hat{x}}{x_0} \right)^2 \right]; \quad E = \hbar\omega\varepsilon. \quad (4.3)$$

4.1.1. Операторный метод

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

$$\begin{aligned} \hat{b} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} + i \frac{\hat{p}}{p_0} \right) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right); \\ \hat{b}^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{x}}{x_0} - i \frac{\hat{p}}{p_0} \right) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Эти операторы неэрмитовы, они не описывают какие-либо измеримые физические величины. В то же время через эти операторы можно выразить операторы всех физических величин (т.к. через них выражаются операторы координаты и импульса). Такой подход удобен для обобщений на более сложные системы.

Нетрудно убедиться, что имеет место важное соотношение:

$$[\hat{b}, \hat{b}^+] = 1. \quad (4.5)$$

С учетом этого соотношения гамильтониан (4.3) принимает вид

$$\hat{\varepsilon} = \hat{b}^+ \hat{b} + 1/2. \quad (4.6)$$

Проверьте, что

$$[\hat{b}^+ \hat{b}, \hat{b}] = -\hat{b} \Rightarrow [\hat{\varepsilon}, \hat{b}] = -\hat{b}; \quad [\hat{b}^+ \hat{b}, \hat{b}^+] = \hat{b}^+ \Rightarrow [\hat{\varepsilon}, \hat{b}^+] = \hat{b}^+. \quad (4.7)$$

Пусть $|n\rangle$ – собственный вектор \hat{H} с энергией $E_n = \hbar\omega\varepsilon_n$, $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$. Рассмотрим действие гамильтониана на состояние $\hat{b}|n\rangle$. Используя соотношения (4.7), получаем цепочку равенств

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

Отсюда получается

$$\hat{\varepsilon}|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle \Rightarrow \begin{cases} \hat{\varepsilon}\hat{b}|n\rangle = (\varepsilon_n - 1)\hat{b}|n\rangle; \\ \hat{\varepsilon}\hat{b}^+|n\rangle = (\varepsilon_n + 1)\hat{b}^+|n\rangle. \end{cases} \quad (4.8)$$

Иными словами,

Пусть $|e\rangle$ – собственный вектор гамильтониана с энергией E_b . Тогда $\hat{b}|e\rangle$ и $\hat{b}^+|e\rangle$ – тоже собственные векторы оператора \hat{H} с энергиями $E_b - \hbar\omega$ и $E_b + \hbar\omega$ соответственно.

Гамильтониан осциллятора представляет собой сумму квадратов двух операторов. Поэтому возможные значения его энергии ограничены снизу. Обозначим наименьшее значение энергии осциллятора через E_0 и соответствующий волновой вектор через $|0\rangle$, т.е. $\hat{H}|0\rangle = E_0|0\rangle$. Но тогда в силу (4.8) должно быть $\hat{H}\hat{b}|0\rangle = (E_0 - \hbar\omega)\hat{b}|0\rangle$. Таким образом, вектор $\hat{b}|0\rangle$ должен соответствовать состоянию с энергией меньшей, чем E_0 . Но такого состояния просто нет, поэтому должно быть¹

$$\hat{b}|0\rangle = 0. \quad (4.9)$$

¹ Решение этого уравнения в x -представлении имеет вид (4.17).

Подстановка этого соотношения в (4.6) даёт $\varepsilon_0 = 1/2$. В силу (4.8) действие оператора \hat{b}^+ на состояние $|0\rangle$ даёт состояние с более высокой энергией $|1\rangle$, действие этого оператора на состояние $|1\rangle$ даёт состояние с ещё более высокой энергией $|2\rangle$, и т.д. Таким способом получается весь набор уровней осциллятора

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &= (n + 1/2), & E_n &= \hbar\omega(n + 1/2); \\ \hat{b}|n\rangle &= d_n|n - 1\rangle & (n &= 0, 1, 2, \dots). \end{aligned} \quad (4.10)$$

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

$$\hat{b}^+\hat{b}|n\rangle = n|n\rangle \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (4.11)$$

Это служит основой широко используемой интерпретации:

• *n-е состояние осциллятора содержит n тождественных частиц — "вибронов" с энергией $E = \hbar\omega$. Оператор $\hat{n} = \hat{b}^+\hat{b}$ есть оператор числа вибронов, оператор \hat{b}^+ — оператор рождения виброна, оператор \hat{b} — оператор уничтожения виброна².*

Определим теперь числа d_n в соотношении между волновыми векторами (4.10), считая их нормированными ($\langle n|n\rangle = 1$) и действительными. Прежде всего, вектор, сопряженный вектору $\hat{b}|n\rangle$, есть $\langle n|\hat{b}^+ = d_n\langle n - 1|$. Таким образом, $\langle n|\hat{b}^+\hat{b}|n\rangle = n\langle n|n\rangle = d_n^2\langle n - 1|n - 1\rangle$. Отсюда следует $d_n^2 = n$, т. е. $\hat{b}|n\rangle = \sqrt{n}|n - 1\rangle$. Подобным образом получается и сопряжённое соотношение:

$$\begin{aligned} \hat{b}|n\rangle &= \sqrt{n}|n - 1\rangle, & \hat{b}^+|n\rangle &= \sqrt{n + 1}|n + 1\rangle \Rightarrow \\ |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{b}^+\right)^n |0\rangle. \end{aligned} \quad (4.12)$$

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

$$\hat{\mathcal{P}}|n\rangle = (-1)^n|n\rangle. \quad (4.13)$$

² Виброны — "домашнее" название в нашем курсе. В реальных задачах это — кванты звуковых колебаний — фононы, кванты электромагнитных колебаний — фотоны и т.п.

• **Энергетическое представление.** Найденные состояния $|n\rangle$ образуют базис энергетического представления для осциллятора. (В соответствии с приведенной выше интерпретацией его называют также и *представлением чисел заполнения*.) Запишем теперь некоторые операторы в этом представлении, т. е. в виде матриц, строки и столбцы которых – номера состояний n (ср. (1.17)).

Для гамильтониана и операторов \hat{b} , \hat{b}^+ ответы выписаны в соотношениях (4.10), (4.12), которые принимают вид:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 3 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 5 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 7 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

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

◇ Чтобы найти вид операторов координаты и импульса в энергетическом представлении, выразим их через операторы \hat{b} и \hat{b}^+ (4.4):

$$\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{b} + \hat{b}^+), \quad \hat{p} = \frac{p_0}{i\sqrt{2}}(\hat{b} - \hat{b}^+). \quad (4.15)$$

После этого получается

$$\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

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

■ **Переход к координатному представлению.**

Чтобы найти волновую функцию основного состояния осциллятора $\psi_0(x)$ в x -представлении запишем уравнение (4.9) в виде

$$\left(\frac{x}{x_0} + x_0 \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = 0.$$

Отсюда

$$\psi_0(x) = C e^{-x^2/2x_0^2}, \quad C = \pi^{-1/4} x_0^{-1/2}. \quad (4.17)$$

Соответственно

$$\begin{aligned} \psi_n(\xi) &= \frac{\hat{b}^+ \psi_{n-1}}{\sqrt{n}} = \frac{1}{\sqrt{2n}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \psi_{n-1} \equiv \frac{-e^{\xi^2/2}}{\sqrt{2n}} \frac{d}{d\xi} \left(e^{-\xi^2/2} \psi_{n-1} \right) \Rightarrow \\ \psi_n(\xi) &= \pi^{-1/4} \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!}} e^{\xi^2/2} \left(\frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2} \equiv \frac{\pi^{-1/4} e^{-\xi^2/2}}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Последнее равенство представляет собой определение *полиномов Эрмита* $H_n(\xi)$.

• ***Обобщение на другие системы.** Операторы \hat{b} , \hat{b}^+ имеют некоторое сходство с проекционными операторами (1.14). Поэтому их можно записать схожим образом. Для этого домножим (4.12) справа на вектор $\langle n|$ и просуммируем по всем значениям n . Тогда (поскольку $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$)

$$\begin{aligned} \sum_n \hat{b}^+ |n\rangle\langle n| &= \sum_n \sqrt{n+1} |n+1\rangle\langle n| \Rightarrow \\ \hat{b}^+ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1} |n+1\rangle\langle n|; \quad \hat{b} = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n} |n-1\rangle\langle n|. \end{aligned} \quad (4.19)$$

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

Такие определения операторов \hat{b} и \hat{b}^+ строятся и для других систем. Так, для бесконечно глубокой потенциальной ямы

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

4.1.2. Решение с помощью разложения в ряд.

Запишем уравнение Шредингера в безразмерных переменных

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

При $\xi \rightarrow \pm\infty$ оно упрощается: $\psi'' \approx \xi^2\psi$, и из него получается $\psi \rightarrow e^{\pm\xi^2/2}$. граничные условия (2.17) выбирают знак "минус".

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

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

Из этого уравнения получается рекуррентное соотношение для коэффициентов $a_{n+2} = \frac{2n + 1 - 2\varepsilon}{(n + 1)(n + 2)}a_n$. Условие $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{a_{n+2}}{a_n} = \frac{2}{n} \rightarrow 0$ обеспечивает сходимость ряда для всех ξ , но при $\xi \rightarrow \pm\infty$ получается: $v(\xi) \rightarrow e^{\xi^2}$. Это соответствует отброшенному решению уравнения, для которого $\psi(\xi \rightarrow \pm\infty) \rightarrow \infty$, т.е. не выполняется граничное условие (2.17). Граничное условие выполняется, только если ряд для $v(\xi)$ обрывается на каком-нибудь n -м члене, т.е. если $2n + 1 - 2\varepsilon = 0$. Это и есть условие для определения собственного значения гамильтониана – энергии осциллятора (4.10). При этом волновые функции имеют вид (4.18), коэффициенты входящих сюда полиномов Эрмита связаны приведёнными выше рекуррентными соотношениями.

4.2. *Когерентные состояния

■ **Предварительные соображения.** Чтобы пояснить, зачем изучаются когерентные состояния, рассмотрим сначала **область фокусирования пучка** (света, электронов, нейтронов) с помощью соотношения неопределенностей. Пусть пучок круглого сечения, движущийся вдоль оси z , фокусируется на плоском экране в пятно радиуса a , т.е. $\Delta x = \Delta y = a$. Угловой разброс пучка характеризуется отношением $\Delta\theta = \Delta p_x/p_z = \Delta p_y/p_z$. Если ещё угловой разброс не зависит от пространственного разброса в фокальной плоскости и от азимутального угла, то радиус пучка на расстоянии z от фокальной плоскости есть

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

Здесь β – расстояние от фокальной плоскости, на котором площадь фокального пятна увеличивается вдвое. В силу соотношения неопределенностей

$$\beta \leq \beta_{max} = \frac{2(\Delta x)^2}{\hbar} p_z \equiv \frac{4\pi(\Delta x)^2}{\lambda} \quad \left(\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p_z}\right).$$

Таким образом, область фокусирования имеет наибольшую протяженность если достигается низший предел в соотношении неопределенностей (для света это – дифракционный предел). Так, для длины волны 1 мкм (ближний инфракрасный свет, лазер на неодимовом стекле или гранате) и при $a = 0.3$ мкм величина $\beta_{max} \approx 1$ мм.

◇ В силу теоремы о вириале средние значения кинетической и потенциальной энергий осциллятора в его собственном состоянии совпадают,

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

Отсюда следует

$$\langle x^2 \rangle_n = x_0^2 \frac{2n+1}{2}; \quad \langle p^2 \rangle_n = p_0^2 \frac{2n+1}{2}. \quad (4.20)$$

Последние соотношения нетрудно получить и прямо из определений операторов \hat{b} или из матричного представления (4.16).

Средние значения координаты и импульса в рассмотренных состояниях равны нулю. (Это следует из симметрии гамильтониана и отсутствия вырождения, и это фактически записано в соотношениях (4.16)). Поэтому соотношения (4.20) дают прямо значения $\Delta x = x_0 \sqrt{n+1/2}$ и $\Delta p = p_0 \sqrt{n+1/2}$. Используя (4.3), имеем поэтому $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}(2n+1)$. Таким образом, произведение неопределенностей координаты и импульса достигает наименьшего значения, отвечающего соотношению неопределенностей (1.26) только в основном состоянии осциллятора. В возбуждённых состояниях разброс значительно больше, соответственно и длина области хорошего фокусирования β значительно меньше.

■ Когерентные состояния.

Существуют, однако, состояния осциллятора, отличающиеся от основного и реализующие тот же минимум произведения неопределенностей и при большой средней энергии, которые приготавливаются, например, в некоторых лазерных вспышках и обеспечивают наилучшее фокусирование лазерных пучков. Это — **когерентные состояния**, определяемые уравнением

$$\hat{b}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad \alpha = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{Q}{x_0} + i \frac{P}{p_0} \right). \quad (4.21)$$

Здесь α – некоторое комплексное число, а Q и P – его действительная и мнимая части.

Решение этого уравнения в координатном представлении получается из решения (4.17) уравнения (4.9) для основного состояния простым сдвигом $x \rightarrow x - \alpha$ (с изменением нормировки из-за комплексности α):

$$\begin{aligned} \psi_\alpha(x) &= \pi^{-1/4} x_0^{-1/2} e^{-(x-Q-iP/m\omega)^2/2x_0^2} \exp\left(-\frac{P^2}{2p_0^2}\right) \equiv \\ &= \pi^{-1/4} x_0^{-1/2} e^{-(x-Q)^2/2x_0^2 - iP(x-Q)/\hbar}. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Эти состояния обеспечивают оптимальное фокусирование.

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

$$\Delta x \Delta p = \hbar/2.$$

Вторая форма волновой функции (4.22) показывает, что когерентное состояние есть волновой пакет с центром в точке Q и с суммарным импульсом P .

Чтобы разобраться в этом состоянии подробнее, разложим его по найденным ранее стационарным состояниям $|k\rangle$:

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

Умножим теперь равенство (4.21) слева на $\langle n|$. Учитывая, что $\langle n|\hat{b} = \sqrt{n+1}\langle n+1|$ (4.12), получим с учетом ортогональности состояний с разными n :

$$\sqrt{n+1}d_{n+1} = \alpha d_n \Rightarrow d_n \equiv \langle n|\alpha\rangle = d_0 \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \Rightarrow$$

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (4.23)$$

(Величина $d_0 = e^{-|\alpha|^2/2}$ получается из условия нормировки). Подставляя сюда выражение для $|n\rangle$ через $(\hat{b})^n|0\rangle$ (4.12), находим отсюда

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha\hat{b}^+)^n}{n!} |0\rangle \equiv e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha\hat{b}^+} |0\rangle. \quad (4.24)$$

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

$$w_n = \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} e^{-|\alpha|^2}, \quad (4.25)$$

Средняя энергия осциллятора в этом состоянии обычно намного превышает $\hbar\omega$, это

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \langle \alpha | \hbar\omega \left(\hat{b}^+ \hat{b} + \frac{1}{2} \right) | \alpha \rangle = \hbar\omega \left(\sum n w_n + \frac{1}{2} \right) \Rightarrow \\ \langle E \rangle &= \hbar\omega \left(|\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right).\end{aligned}\quad (4.26)$$

Среднее значение числа "вибронов" в этом состоянии есть $|\alpha|^2$.

То же разложение по стационарным состояниям позволяет найти эволюцию когерентного состояния со временем. Напомним, что волновая функция состояния $|n\rangle$ меняется со временем по закону $|n\rangle e^{-iEt/\hbar} \equiv |n\rangle e^{-it\omega n - it\omega/2}$. В итоге

$$|\alpha(t)\rangle = \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\omega n t - i\omega/2 t} \equiv e^{-i\omega t/2} \sum_n \frac{(\alpha e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}.\quad (4.27)$$

Итак, мы выяснили, что эволюция состояния со временем описывается заменой

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

Вспоминая теперь связь $\alpha(t)$ с координатой центра тяжести и импульсом пакета (4.21), найдем закон их изменения со временем:

$$Q(t) = Q \cos \omega t - \frac{P}{m\omega} \sin \omega t; \quad P(t) = P \cos \omega t + m\omega Q \sin \omega t.\quad (4.28)$$

Таким образом, центр тяжести этого волнового пакета движется в точности как классическая частица.

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

4.3. Задачи

Задачи 1–3 – для гармонического осциллятора.

1. Найти волновые функции в импульсном представлении.
2. Сравнить классическую dw/dx и квантовую $|\psi_n(x)|^2$ плотности вероятности при $n = 0$ и $n \gg 1$. Найти вероятность того, что в основном состоянии осциллятор имеет $|x| \ll l$, $|p| \ll k$.
3. Построить операторы \hat{x}^2 , \hat{p}^2 в энергетическом представлении.

4. Найти перестановочные соотношения операторов кинетической энергии гармонического осциллятора, взятых в разные моменты времени. Записать соответствующее соотношение неопределённостей. Разобрать случаи собственных состояний осциллятора и их суперпозиции.
5. Найти уровни энергии и волновые функции для частицы в поле

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

6. Покажите, что $[\hat{b}, (\hat{b}^+)^n] = n(\hat{b}^+)^{n-1}$. Вычислите $[\hat{b}^2, (\hat{b}^+)^n]$. Докажите, что $[\hat{b}, f(\hat{b}^+)] = df(\hat{b}^+)/d\hat{b}^+$.
7. Найти перестановочные соотношения для операторов $\hat{A}_1 = \frac{\hat{b}^+\hat{b}^+ + \hat{b}\hat{b}}{4}$, $\hat{A}_2 = \frac{\hat{b}^+\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^+}{4}$, $\hat{A}_3 = i\frac{\hat{b}^+\hat{b}^+ - \hat{b}\hat{b}}{4}$.
8. Найти собственные значения оператора $\hat{b}^+\hat{b} + \lambda\hat{b}^+ + \lambda^*\hat{b}$.
9. Покажите, что для когерентного состояния $\Delta p \Delta x = \hbar/2$.
10. Начальное состояние частицы, помещённой в полу упругих сил $U = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ описывается волновой функцией $\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2a^3}{\pi}} \frac{1}{x^2 + a^2}$. Найти вероятность того, что её энергия равна $\hbar\omega/2$, $3\hbar\omega/2$. (Считать, что $a^2 \ll \hbar/(m\omega)$.)
11. Начальное состояние частицы, помещённой в полу упругих сил $U = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ описывается волновой функцией $\psi(x, 0) = Nx(1-x)$. Найти среднее значение её координаты $\langle x(t) \rangle$ в зависимости от времени.
12. Докажите, что набор когерентных состояний полон, т.е.

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

Глава 5

ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ

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

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

Помимо того, рассматриваемые методы различаются по "степени регулярности". В некоторых из них построение последующих приближений – задача той же принципиальной сложности, что и для первого приближения. Отличие состоит лишь в степени громоздкости приближений (теория возмущений). В других случаях следующие приближения по существу сложнее первых, иногда надо включать новые идеи (надбарьерное отражение в квазиклассическом методе). Наконец, нередко регулярный метод для построения последующих приближений, по меньшей мере, трудно предложить (вариационный метод).

5.1. Вариационный метод

- Собственные функции гамильтониана \hat{H} образуют полную систему $\psi_n(x)$ (с собственными значениями E_n). Это значит, что для любой нормированной функции $\psi(x) = \sum a_n \psi_n(x)$ и $\sum |a_n|^2 = 1$. Образует теперь величину $\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \equiv \int \psi^* \hat{H} \psi dx$. В силу уравнения Шредингера

$\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = \sum |a_n|^2 E_n \geq E_0$. Таким образом,

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

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

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

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

▽ Выше мы получали оценки для уровней энергии в простых потенциалах, исходя из соотношения неопределенностей. Применявшийся подход был в сущности упрощённой версией вариационного метода.

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

▼ *Пример:* рассмотрим поле $U = -G\delta(x)$ и воспользуемся (нормированной) пробной функцией вида $\psi_b = \pi^{-1/4} b^{-1/2} \exp(-x^2/2b^2)$. Вычислим среднее значение энергии с этой функцией:

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

Далее найдем минимум этого выражения по b :

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

Сравните эти выражения с точным решением (гл. 2).

5.2. Теория возмущений

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

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

Гамильтониан \hat{H}_0 называют невозмущенным, а V – *возмущением*. Далее мы поймём, что такое "мало". Без потери общности можно считать набор собственных векторов $|n\rangle_0$ ортонормированным, $\langle m_0|n_0\rangle = \delta_{mn}$.

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

Итак, мы ищем решение уравнения Шредингера

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

Здесь удобно записывать оператор возмущения \hat{V} в представлении собственных векторов невозмущённого гамильтониана, т.е. в виде матрицы:

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

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

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

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

Тогда уравнение (5.3) примет вид

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

Умножим это уравнение слева на $\langle k|_0$. С учётом ортогональности ($\langle k|m\rangle_0 = \delta_{km}$) и определения (5.4) мы получим:

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

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

5.2.1. Невырожденный случай

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

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

▼ Первое приближение. При $k = n$ остаются два слагаемых. Получается $E_n^{(1)} = V_{nn}$. При $k \neq n$ получается уравнение

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

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

▼ Второе приближение строится так же, и дает при $k = n$:

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

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

Теперь можно записать найденные решения, положив в них $\epsilon = 1$:

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

¹ В действительности, в промежуточных вычислениях можно выбирать любое удобное значение этого коэффициента и использовать независимость физических результатов от этой неоднозначности коэффициента c_{nn} (*ре-нормализационная инвариантность*). Подобный приём оказался очень плодотворным при изучении задач физики элементарных частиц и конденсированного состояния.

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

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

◆ *Примеры*

1. Вычислите в первом неисчезающем приближении поправки к энергии гармонического осциллятора в полях: а) $V = ax$; б) $V = bx^2/2$. Сравните с точными решениями.
2. **Производная от энергии по параметру.** Пусть $\hat{H} = \hat{H}(\lambda)$ — непрерывная функция параметра λ . Тогда $\hat{H}(\lambda + \Delta\lambda) \equiv \hat{H}_0 + \hat{V} \rightarrow \hat{V} = \Delta\lambda \partial \hat{H} / \partial \lambda$. Поправка к энергии $E_n^1 = V_{nn} \equiv \langle n | \Delta\lambda \frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} | n \rangle$. С другой стороны, $E_n^1 = \Delta\lambda (\partial E_n / \partial \lambda)$, поэтому

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

5.2.2. Теория возмущений при наличии вырождения

Вырождение означает, что по крайней мере одному собственному значению E_n^0 соответствует $s > 1$ (ортогональных) собственных векторов. В этом случае при попытке воспользоваться полученными выше результатами некоторые из знаменателей (5.9) обратятся в нуль. Это не было бы опасно, если бы возмущение не снимало вырождения, т.е. если бы были равны нулю и соответствующие матричные элементы в числителях. В общем случае, однако, это не так. Идея метода состоит в том, чтобы научиться исключать это деление на нуль и в общем случае.

Рассмотрим нашу группу из s собственных векторов, отвечающих вырожденному собственному значению энергии E_n^0 . Для их обозначения введем на время двойную нумерацию $|nj\rangle$, $j = 1, \dots, s$. Эти функции можно рассматривать как ортонормированный базис в s -мерном подпространстве всего Гильбертова пространства состояний. Назовем его C_s . Любой вектор этого подпространства является собственным вектором невозмущенного гамильтониана с одним и тем же собственным значением E_n^0 . Это означает, что базисом в C_s можно избрать и любые ортогональные друг другу линейные комбинации функций $|nj\rangle$, т.е.

$|\tilde{n}\alpha\rangle = \sum_j c_{\alpha j}^0 |nj\rangle$. В частности, проблема деления на нуль исчезнет, если избрать такой базис, в котором недиагональные матричные элементы возмущения обратились бы в нуль, т. е. матрица возмущения $V_{ni,nj} \equiv V_{ij}$ стала бы диагональной на подпространстве C_s .

▼ **Простой пример**, иллюстрирующий схему – плоский осциллятор $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2(x^2 + y^2)}{2}$. Этот гамильтониан обладает симметрией относительно вращений в плоскости (x, y) . Значения его уровни – суммы энергий независимых осцилляторов по осям x и y : $E_n^{(0)} = \hbar\omega(n_x + 1/2 + n_y + 1/2) \equiv \hbar\omega(n + 1)$, $(n = n_x + n_y)$. Соответствующие собственные векторы $|nj\rangle$ мы будем обозначать $|n_x n_y\rangle \equiv |n_x\rangle|n_y\rangle$.

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

Рассмотрим теперь разные возможные возмущения.

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

▼ Возмущение $V = bx^2$ нарушает симметрию. Оно "направлено" вдоль одной из первоначально выбранных осей. Матрица возмущения диагональна, но не пропорциональна единичной – $bx_0^2/2 \cdot \text{diag}(7, 5, 3, 1)$. Недиагональные элементы по прежнему отсутствуют, проблемы деления на нуль не возникает.

▼ Возмущение $V = b(x + y)^2/2$ получается из предыдущего при повороте осей на 45 градусов, поэтому и результат здесь должен совпадать с предыдущим. Однако при нашем выборе осей матрица возмущения уже недиагональна. Она имеет вид:

$$\frac{bx_0^2}{4} \begin{pmatrix} 8 & 2\sqrt{3} & 0 & 0 \\ 2\sqrt{3} & 8 & 4 & 0 \\ 0 & 4 & 8 & 2\sqrt{3} \\ 0 & 0 & 2\sqrt{3} & 8 \end{pmatrix}.$$

Диагонализация этой матрицы дает, как и следовало ожидать, те же собственные значения, что и в предыдущем случае. Новые собственные векторы – суперпозиции старых, получаемые вращением осей на 45 гра-

дусов. После этой диагонализации проблема деления на нуль исчезла, и задача свелась к предыдущей.

◆ Обычно вырождение не является случайным. Оно возникает в силу наличия какой-то симметрии невозмущенного гамильтониана (в нашем случае – относительно вращений в плоскости x, y). Если возмущение обладает той же симметрией, то его недиагональные матричные элементы (5.4) по состояниям, принадлежащим вырожденному уровню – нули (а все диагональные совпадают), и проблема не возникает. Если же возмущение не обладает этой симметрией, т. е. *полный гамильтониан описывает систему с нарушенной симметрией*, то при неудачном выборе исходного базиса недиагональные матричные элементы возмущения (5.4) – не нули. Задача состоит в выборе базиса, привязанного не к произвольным пространственным осям, а к таким, где одна из координатных осей направлена "вдоль возмущения".

Обсуждаемый ниже метод решения не зависит от того, является ли вырождение случайным или оно связано с какой-то симметрией невозмущенного гамильтониана.

■ **Общее решение.** Рассмотрим в уравнении (5.6) в качестве состояния $|k\rangle_0$ одно из состояний $|ni\rangle$. Тогда в нулевом порядке по ϵ получается тождество $E_n^{(0)} = E_n^{(0)}$. В первом порядке по ϵ для $c_{\alpha j}^0$ получается система уравнений

$$\sum (V_{ij} - E_{n\alpha}^{(1)} \delta_{ij}) c_{\alpha j}^0 = 0. \quad (5.12)$$

Решения этой системы однородных линейных уравнений для коэффициентов $c_{\alpha j}^0$ – не нули, только если обращается в нуль определитель, составленный из коэффициентов при неизвестных:

$$\det |V_{ij} - E_{n\alpha}^{(1)} \delta_{ij}| = 0. \quad (5.13)$$

Это уравнение называют секулярным. Оно имеет s корней $E_{n\alpha}^1$ – собственных значений оператора \hat{V} (матрицы V_{ij}). Поэтому, в частности,

$$\sum_{\alpha=1}^s E_{n\alpha}^1 = \sum V_{ii} \quad (\equiv Tr(V)).$$

При каждом из собственных значений $E_{n\alpha}^1$ система (5.12) позволяет выразить $s - 1$ коэффициент $c_{\alpha j}$ через один из них. С учетом условия нормировки определяются все эти коэффициенты, т.е. "повёрнутые" собственные векторы задачи $\sum_i c_{\alpha j}^0 |j\rangle$.

Дальнейшие поправки ищутся так же, как и в невырожденном случае.

◆ **Пример: Двухуровневая система.** В этом случае $s = 2$. Обозначим расстояние между невозмущёнными уровнями через $U = V_{11} - V_{22}$. Секулярное уравнение имеет вид:

$$\begin{vmatrix} V_{11} - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (5.14)$$

$$\Rightarrow E_{\pm}^{(1)} = \frac{V_{11} + V_{22} \pm \Delta E}{2} \quad \left(\Delta E = \sqrt{U^2 + 4|V_{12}|^2} \right).$$

Соответствующие волновые функции $|+\rangle$ и $|-\rangle$ имеют вид

$$|+\rangle = c_{1+}|1\rangle + c_{2+}|2\rangle, \quad |-\rangle = c_{1-}|1\rangle + c_{2-}|2\rangle;$$

$$c_{1+} = -c_{2-} = \sqrt{\frac{\Delta E + U}{2\Delta E}}, \quad c_{2+} = c_{1-} = \sqrt{\frac{\Delta E - U}{2\Delta E}}.$$

5.2.3. Системы с близко расположенными уровнями

Рассмотрим теперь "близкие к вырождению" системы, где состояния разбиваются на группы с близко расположенными уровнями, а энергетические расстояния между группами достаточно велики. (*Обычно это – системы со слабо нарушенной симметрией.*) При этом в ряду теории возмущений появляются слагаемые с малыми знаменателями, и сходимость ряда ухудшается.

Ситуация улучшится, если ввести "гамильтониан асимметрии" $\Delta \hat{H}$, собственными значениями которого являются отклонения невозмущённых энергий в группе от какого-то среднего значения. После этого можно воспользоваться методом, изложенным выше, и рассмотреть задачу о диагонализации "гамильтониана" $\Delta \hat{H} + V$ на попространстве C_s .

Итак, обозначим через ϵ_i невозмущённые энергии состояний группы. Повторяя выкладки случая с вырождением для каждой из этих групп, мы придем к уравнениям вида (5.12,5.13) с заменой

$$V_{ij} - E_{n\alpha}^1 \delta_{ij} \Rightarrow V_{ij} - (E_{n\alpha}^1 + \epsilon_i) \delta_{ij}. \quad (5.15)$$

Окончательный ответ имеет тот же вид, что и в случае вырождения, с заменой $V_{ii} \rightarrow \tilde{V}_{ii} = V_{ii} + \epsilon_i$.

В частности, для двухуровневой системы секулярное уравнение легко получается из (5.14),

$$\begin{vmatrix} V_{11} + \epsilon_1 - E^{(1)} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} + \epsilon_2 - E^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (5.16)$$

Полезно заметить, что при $|V_{12}| \ll |\epsilon_1 - \epsilon_2|$ отсюда, как и следовало ожидать, получаются формулы обычной теории возмущений без вырождения (с точностью до второго порядка):

$$E_+^{(1)} = \epsilon_1 + V_{11} + \frac{|V_{12}|^2}{\epsilon_1 - \epsilon_2}, \quad E_-^{(1)} = \epsilon_2 + V_{22} + \frac{|V_{12}|^2}{\epsilon_2 - \epsilon_1}.$$

▽ Рассмотрим, как меняются получившиеся уровни с изменением возмущения. Будем описывать это изменение параметром ξ . Пусть при некотором $\xi = \xi_0$ оказывается $\tilde{V}_{11} = \tilde{V}_{22}$. Тогда — на первый взгляд — при переходе от $\xi > \xi_0$ к $\xi < \xi_0$ уровни E_+ и E_- поменяются местами: тот из них, который был выше, станет ниже, и наоборот — произойдет пересечение уровней. На самом деле, это не так. Для действительного пересечения уровней, когда они в точности совпали бы, требуется, чтобы в (5.14) было $\Delta E = 0$. Для этого недостаточно условия $\tilde{V}_{11}(\xi) = \tilde{V}_{22}(\xi)$, необходимо еще, чтобы было $V_{12}(\xi) = 0$. Это — два разных уравнения для одной величины ξ , обычно их одновременное решение отсутствует (если при этом не восстанавливается старая симметрия или не появляется новая). *Пересечение уровней — очень редкое событие в природе.*

5.3. Квазиклассическое приближение

Есть еще один важный случай, для которого разработан формально последовательный метод приближенного решения квантовомеханических задач, это задачи, в которых потенциал — плавная функция координаты так, что дебройлевская длина волны мала по сравнению с масштабом изменения потенциала и меняется с координатой достаточно медленно. Это близко к картине классической оптики, которая, в свою очередь, допускает описание, подобное классической механике. Именно это соответствие и является стартовой точкой метода. Здесь сначала строится классическое описание, а затем отыскиваются квантовые поправки². Формально этот — *квазиклассический* случай отвечает пределу $\hbar \rightarrow 0$. Интерес к этому случаю подкрепляется тем, что в соответствующих задачах прослеживаются детали перехода к классическому пределу.

Мы разберем здесь только одномерное движение. Обобщение на трёхмерные задачи возможно далеко не во всех ситуациях.

² К сожалению, получающиеся ряды — *асимптотические*. Поэтому хорошее приближение дают только несколько первых членов этих рядов.

∇ При исследовании задач квазиклассического приближения мы используем терминологию соответствующей классической задачи. Так, область, где потенциальная энергия меньше полной, $E > U(x)$, – *область классического движения*. Область, где потенциальная энергия больше полной, $E < U(x)$, – *классически недостижимая область*. Точки, где $E = U(x)$, – *точки поворота* (в этих точках классическая частица меняет направление своего движения, натолкнувшись на край ямы).

Далее вводятся зависящие от координат величины – импульс $p(x)$, волновое число $k(x) = p(x)/\hbar$ и длина волны $\lambda(x)$, а также "параметр затухания" $\varkappa(x)$:

$$\begin{aligned} k(x) &= \frac{\sqrt{2m(E - U(x))}}{\hbar}, & \lambda(x) &= \frac{2\pi}{k(x)} \text{ при } E > U(x) \\ \varkappa(x) &= \frac{\sqrt{2m(U(x) - E)}}{\hbar} \text{ при } E < U(x). \end{aligned} \quad (5.17)$$

◆ Запишем волновую функцию в виде

$$\psi(x) = e^{iS(x)/\hbar} \quad (5.18a)$$

и разложим функцию $S(x)$ в ряд по степеням \hbar :

$$S = S_0 + \frac{\hbar}{i}S_1 + \left(\frac{\hbar}{i}\right)^2 S_2 + \dots \quad (5.18b)$$

Это – формальное разложение по размерной константе, однако его использование даёт разумный результат. Если определить величину d как размер, на котором существенно меняется потенциал, то можно сказать, что параметром разложения является величина $1/kd \sim (\lambda/d)$. Более аккуратная оценка для параметра разложения обсуждается ниже.

Подстановка в уравнение Шредингера $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$ даёт уравнение (типа Рикатти):

$$\frac{1}{2m}(S'(x))^2 + U(x) - E - \frac{i\hbar}{2m}S''(x) = 0$$

Приравнивая члены с одинаковыми степенями \hbar , получим уравнения:

$$\frac{1}{2m}(S'_0(x))^2 = E - U(x), \quad -\frac{i\hbar}{m}S'_0S'_1 = \frac{i\hbar}{2m}S''_0, \dots \quad (5.18c)$$

Первое из этих уравнений³ легко решается:

$$S_0(x) = \pm \int p(x) dx. \quad (5.19)$$

Второе уравнение (5.18с) дает $S'_1 = -S''_0/2S'_0$, то есть $S_1 = -(1/2) \ln(S'_0) = -(1/2) \ln[p(x)]$. В итоге, в обозначениях (5.17) волновая функция имеет вид плоской волны, нормированной на поток (2.10b):

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{C_1}{\sqrt{k(x)}} e^{i\alpha} + \frac{C_2}{\sqrt{k(x)}} e^{-i\alpha} & \text{при } E > U(x); \\ \frac{D_1}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{-\beta} + \frac{D_2}{\sqrt{\kappa(x)}} e^{\beta} & \text{при } E < U(x); \end{cases} \quad (5.20)$$

$$\alpha = \int k(x) dx, \quad \beta = \int \kappa(x) dx.$$

• Чтобы квазиклассическое приближение было применимо, классическое действие S_0 во всяком случае должно быть велико по сравнению с квантом действия

$$\int p(x) dx / \hbar \gg 1. \quad (5.21a)$$

Вообще говоря, этого недостаточно. Наше приближение оправдано, если поправка мала по сравнению с главным членом, т.е. при $\hbar |S_1(x)| \ll |S_0(x)|$. Разумеется, здесь надо рассматривать только зависящую от координат часть, поэтому аккуратнее записать это неравенство для производных, $\hbar |S'_1(x)| \ll |S'_0(x)|$. Подставляя сюда найденное выражение для $S'_1(x)$, получаем неравенство, определяющее применимость приближения в виде: $|\hbar S''_0| \ll (S'_0(x))^2$. Отсюда прямым вычислением получаются две формы условия применимости приближения

$$\left| \frac{m\hbar(dU/dx)}{p(x)^3} \right| \ll 1 \Rightarrow \frac{1}{2\pi} \left| \frac{d\lambda(x)}{dx} \right| \ll 1. \quad (5.21b)$$

Последнее неравенство означает попросту, что введённые локальные величины (5.17) физически осмысленны, в частности, что длина волны лишь немного меняется на расстоянии $\lambda(x)$, это изменение $\Delta\lambda = \lambda d\lambda/dx$ много меньше самой длины волны $\lambda(x)$.

³ Это – известное в аналитической механике уравнение Гамильтона – Якоби. В нём $S_0(x)$ есть *действие* как функция координат.

∇ Для многих оценок фактическим параметром малости приближения является величина $(1/\pi n)^2$, где n – число узлов (нулей) волновой функции. Это – малое число для всех n , поэтому квазиклассическое решение очень часто даёт разумный ответ.

■ **Условия сшивки.** Квазиклассическое приближение неприменимо вблизи точек поворота (при $U(x) \approx E$), поскольку здесь $d\lambda/dx \rightarrow \infty$, т. е. нарушаются условия (5.21b). Для полного описания физической ситуации решения (5.20) следует дополнить решением в окрестности точки поворота $x = a$. Здесь можно записать разложение

$$U(x) = E + F \cdot (x - a), \quad (5.22)$$

где F – некоторый коэффициент (сила). Это приближение обычно остаётся справедливым и на краю квазиклассической области. Поэтому следует решить уравнение Шредингера в окрестности точки поворота

$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + (x-a)F\psi(x) = 0$ и сравнить асимптотики волновой функции при $x \rightarrow +\infty$ и $x \rightarrow -\infty$. (В импульсном представлении это уравнение принимает вид $p^2\psi(p)/2m + iF\hbar d\psi(p)/dp = 0$, его решение есть $\psi(p) = A \exp(ip^3/6\hbar Fm)$. Нетривиальным оказывается переход к координатному представлению.) В итоге получаются правила сшивки для перехода из расположенной справа области классически недостижимой в расположенную слева область классического движения

$$\begin{aligned} \frac{A}{2\sqrt{\kappa}} \exp\left(-\int_a^x \kappa dx\right) &\rightarrow \frac{A}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_x^a k dx + \pi/4\right), \\ \frac{B}{\sqrt{\kappa}} \exp\left(\int_a^x \kappa dx\right) &\rightarrow \frac{B}{\sqrt{k}} \cos\left(\int_x^a k dx + \pi/4\right). \end{aligned} \quad (5.23)$$

Для потенциалов со скачками подобные условия имеют вид (2.14), (2.15)

При переходе справа налево можно уверенно говорить о возможности читать в этом направлении второе из приведенных условий сшивки. При таком же чтении первого из них нас подстерегает опасность. В правой области мы получаем экспоненциально убывающее решение. Уже малая неточность в вычислении фазы синуса означает присутствие добавки, которая превратится справа в экспоненциально растущий член. Правильность приведенных правил сшивки обеспечивается сохранением вронскиана (2.13) при переходе через точку поворота. Из-за указанной неустойчивости в получаемых результатах не всегда удастся контролировать коэффициенты перед экспоненциально малыми членами.

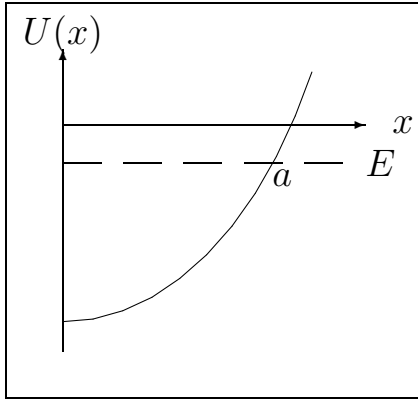
◇ Подобная неустойчивость является общей чертой описания множества природных процессов, от астрофизики до явлений общественной жизни. Долговременные предсказания на основе современных тенденций могут не иметь ничего общего с реальностью из-за первоначально очень малых, но экспоненциально растущих возмущений.

◆ Если классически достижимая область ограничена бесконечно высокой стенкой при $x = a$ (как это имеет место при описании радиального движения в трёхмерном случае, когда $a = 0$), то при $x = a$ волновая функция обращается в ноль, а квазиклассическое приближение справедливо вплоть до стенки, т.е.

$$\psi = \begin{cases} \frac{C}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_a^x p dx\right) & \text{при } x > a, \\ 0 & \text{при } x < a. \end{cases} \quad (5.24)$$

5.3.1. Правила квантования Бора–Зоммерфельда

Пусть потенциальная яма имеет вид, изображённый на рисунке. Здесь область $x < 0$ полностью недоступна (как для радиального движения в центрально-симметричном поле). Будем искать уровни энергии, пользуясь алгоритмом, который подобен используемому при компьютерном моделировании.



Поскольку область $x < 0$ недоступна, то в соответствии с (5.24) внутри ямы $\psi(x) = \frac{A}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_0^x k dx\right)$. Теперь в нашем построении

надо пройти точку поворота. Чтобы воспользоваться условиями сшивки (5.23), введем величины

$$\alpha = \int_0^a k dx + \pi/4, \quad \varphi = \int_x^a k dx + \pi/4 \quad (5.25)$$

и перепишем волновую функцию внутри ямы в виде

$$\frac{A}{\sqrt{k}} \sin\left(\int_0^x k dx\right) = \frac{A}{\sqrt{k}} \sin(\alpha - \varphi) = \frac{A}{\sqrt{k}} (\sin \alpha \cos \varphi - \cos \alpha \sin \varphi).$$

Далее, воспользуемся условиями сшивки для каждого из слагаемых и получим волновую функцию в классически недоступной области

$$\psi = \frac{A}{\sqrt{\kappa}} \sin \alpha \cdot \exp\left(\int_a^x \kappa dx\right) - \frac{A}{2\sqrt{\kappa}} \cos \alpha \cdot \exp\left(-\int_a^x \kappa dx\right).$$

Волновая функция должна убывать при $x \rightarrow \infty$. Поэтому стационарными являются только такие состояния, для которых коэффициент при растущей экспоненте ($\sin \alpha$) обращается в нуль, т.е. при $\alpha = \pi(n + 1)$. Иными словами, энергия уровня E определяется из уравнения (*квази-классическое условие квантования*)

$$\oint \sqrt{2m(E - U(x))} dx = 2\pi\hbar(n + 3/4). \quad (5.26a)$$

(Мы удвоили обе части равенства. Это дало слева интеграл по периоду классического движения — от 0 до a и от a до 0.)

Покажите, что для потенциала, гладкого в обе стороны, условие квантования (Бора-Зоммерфельда) есть

$$\oint \sqrt{2m(E - U(x))} dx = 2\pi\hbar(n + 1/2). \quad (5.26b)$$

(Различие между $1/2$ и $3/4$ в приведенных правилах квантования улавливается точностью приближения даже при умеренно больших n .)

В обоих случаях при монотонном изменении x аргумент синуса в $\psi(x)$ меняется от 0 или $\pi/4$ до $\pi(n + 3/4)$, т.е. $\psi(x)$ имеет n нулей в классически достижимой области (в соответствии с осцилляционной теоремой).

В соответствии с критерием (5.21a), условия квантования дают хорошее описание решений только при больших n .

Чтобы найти *нормировку волновой функции*, надо вычислить интеграл от квадрата ее модуля. При этом достаточно учесть только вклад классически доступной области (вне этой области волновая функция быстро убывает):

$$1 = \int_0^a |\psi(x)|^2 dx = \frac{A^2}{2} \oint \frac{dx}{k(x)} \sin^2\left(\int_0^x k(x') dx'\right) =$$

$$\frac{A^2\hbar}{4} \oint \frac{dx [1 - \cos(2 \int_0^a k(x') dx')]}{\sqrt{2m(E - U(x))}} \approx \frac{A^2\hbar}{4} \cdot \oint \frac{dx}{p(x)}.$$

(В последнем переходе мы учли, что аргумент косинуса не мал, поэтому сам косинус быстро осциллирует, и его среднее значение близко к нулю).

В знаменателе последнего интеграла стоит классический импульс частицы, $p(x) = mv(x)$, где $v(x)$ – классическая скорость частицы. Поэтому интеграл равен периоду классического движения частицы (от 0 до a и от a до 0) $T_{\text{кл}}$, делённому на m . В итоге

$$A = \sqrt{\frac{4m}{\hbar T_{\text{кл}}}} \equiv \sqrt{\frac{2m\omega_{\text{кл}}}{\pi\hbar}} \quad \left(\omega_{\text{кл}} = \frac{2\pi}{T_{\text{кл}}} \right). \quad (5.27)$$

Продифференцируем теперь правила квантования по n :

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

Отсюда следует, что разность энергий соседних уровней описывается простым соотношением (которое лежало в основе ранней – непоследовательной – версии квантовой механики)

$$E_{n+1} - E_n = \Delta n \frac{dE_n}{dn} \equiv 1 \cdot \frac{2\pi\hbar}{T_{\text{кл}}} = \hbar\omega_{\text{кл}}$$

■ При обсуждении некоторых классических и квазиклассических задач удобно использовать понятие **фазового пространства** – пространства, координатами которого являются компоненты всех координат и всех импульсов частиц системы. В частности, для системы из N частиц в трехмерном пространстве фазовое пространство – $6N$ -мерно, для одной частицы на прямой – двумерно. Классическое движение частицы описывается кривой в фазовом пространстве (фазовый портрет, фазовая траектория). Квазиклассическое состояние можно описывать некоторым распределением плотности в фазовом пространстве.

Для полученных решений *фазовая площадь* $\oint p dx$ растет линейно с ростом номера состояния n , так что в фазовом пространстве на каждое состояние приходится площадь $2\pi\hbar$, а число возможных состояний в ячейке $\Delta x \Delta p$ есть

$$\Delta n = \Delta x \Delta p / (2\pi\hbar). \quad (5.28)$$

(Разумеется, сказанное справедливо только для достаточно больших n , для основного и первых возбуждённых состояний квазиклассическое приближение обычно неприменимо.)

5.3.2. Прохождение через барьер

Задача о прохождении через потенциальный барьер решается по стандартному рецепту с двукратным использованием правил сшивки (5.23). При этом получается коэффициент прохождения (*туннелирования*)

$$D = \exp \left[-2 \int_a^b \kappa(x) dx \right] \quad (a \text{ и } b - \text{ точки поворота }). \quad (5.29)$$

(Напомним — для прямоугольного барьера коэффициент прохождения описывается похожим соотношением $D \approx \exp[-2\kappa(b-a)]$).

5.3.3. Квазистационарные состояния

◆ *Определения.* Возбуждённые состояния квантовых систем нестационарны, они распадаются (излучение ядер, атомов, молекул, радиоактивный распад ядер и т.д.). Нередко эти состояния лишь слабо отличаются от обычных стационарных состояний (на классическом языке эти состояния деградируют за много периодов основного движения). Такие состояния называют *квазистационарными состояниями* – квазиуровнями. Вероятность перехода из возбужденного состояния за единицу времени для каждого атома или ядра не зависит от общего числа атомов или ядер в системе, т.е. (закон распада) $dN(t) = -\gamma N(t)dt \Rightarrow N(t) = N(0)e^{-\gamma t}$. В соответствии с этим определяются следующие величины:

$$\tau = \gamma^{-1} - \text{время жизни, } \Gamma = \hbar\gamma - \text{ширина (квази)уровня.}$$

Последовательное применение аппарата квантовой механики требует рассмотреть не только распадающиеся состояния, но и те состояния, которые получаются в распаде. Мы не будем делать этого. При этом придется отказаться от требования сохранения вероятности, и рассмотрение неизбежно становится лишь приближённым.

◇ При попытке описать квазистационарные состояния, используя подходы, разработанные для стационарной задачи, следует изменить форму граничного условия, чтобы учесть убывание вероятности со временем. Вместо условия убывания волновой функции на бесконечности мы потребуем, чтобы на больших расстояниях волна уходила из центра и не было приходящей волны (это и даст убывание вероятности со временем). Из этого условия получатся комплексные значения энергии

$$\tilde{E}_n = E_n - i\Gamma_n/2, \quad (5.30)$$

где Γ_n – поначалу просто некоторая небольшая величина. Зависимость соответствующей волновой функции от времени описывается множителем $\exp(-i\tilde{E}_n t/\hbar) \equiv \exp(-iE_n t/\hbar - \Gamma_n t/2\hbar)$, т.е. если такое состояние создано, его амплитуда со временем падает. При этом вероятность $W = |\psi(\vec{r}, t)|^2 \sim e^{-\Gamma_n t/\hbar}$, т.е. Γ_n – ширина этого квазиуровня. Фурьеобраз этой волновой функции есть

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

В окрестности полюса можно пренебречь зависимостью коэффициента R от E , и спектральный состав состояния есть (как и для обычного осциллятора с трением)

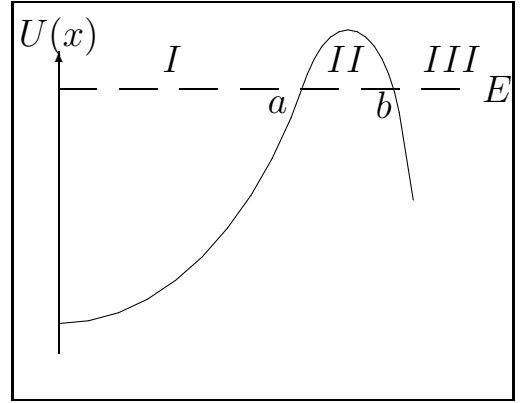
$$dW(E) \propto |\psi(E)|^2 \rightarrow \frac{\Gamma}{(E - E_n)^2 + \Gamma_n^2/4}.$$

Таким образом, у квазистационарного состояния ширина резонансной кривой $\Delta E = \Gamma$. При $\Gamma \rightarrow 0$ имеем $dW/dE \rightarrow \delta(E - E_n)$ (ср. (A.2)).

Видно, что квазиуровень очень похож на виртуальный уровень, разд. 2.6.1.

Чтобы увидеть, как возникает *квазиуровень*, рассмотрим частицу в поле, изображенном на рисунке.

Последовательное применение условий сшивки (5.23) (как при квантовании) дает с использованием обозначений (5.25), (5.29)



$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{A}{\sqrt{k}} \sin \left(\int_0^x k dx \right), & (I) \\ \frac{A}{\sqrt{\kappa}} \left[\sin \alpha \cdot \exp \left(\int_a^x \kappa dx \right) - \frac{\cos \alpha}{2} \cdot \exp \left(- \int_a^x \kappa dx \right) \right] = & (II) \\ \frac{A}{\sqrt{\kappa D}} \left[\sin \alpha \exp \left(- \int_x^b \kappa dx \right) - D \frac{\cos \alpha}{2} \exp \left(\int_x^b \kappa dx \right) \right], & \\ \frac{A}{\sqrt{k D}} \left[2 \sin \alpha \cdot \sin \left(\int_b^x k dx + \pi/4 \right) - \right. & (III) \\ \left. D \frac{\cos \alpha}{2} \cdot \cos \left(\int_b^x k dx + \pi/4 \right) \right]. & \end{cases} \quad (5.31)$$

Условие, чтобы в области III была только уходящая волна $\exp(i \int_{x_0}^x k dx)$, дает уравнение:

$$\frac{2 \sin \alpha}{\left(-\frac{D \cos \alpha}{2}\right)} = i \Rightarrow \operatorname{tg} \alpha = -iD/4. \quad (5.32)$$

(Подобный ответ для системы прямоугольных барьеров и ям получается с помощью условий сшивки (2.15).)

Далее мы считаем туннелирование слабым, т.е. $D \ll 1$.

При $b \rightarrow \infty$ было бы $D = 0$, и в системе нашлись бы стационарные состояния с энергиями $E = E_n$, которые были найдены в разд. 5.3.1. При $D \neq 0$ движение инфинитно, т.е. стационарных состояний нет. Однако физическая ситуация при $D \ll 1$ не может сильно измениться по сравнению со случаем $D = 0$, и решения уравнения (5.32) должны лишь ненамного отличаться от решений условий квантования $\alpha = \pi(n + 1)$ (5.26а). Поэтому запишем $\alpha = \pi(n + 1) + \delta_n$, где $|\delta_n| \ll 1$. Тогда уравнение (5.32) преобразуется к виду

$$-iD/4 = \operatorname{tg} \delta_n \approx \delta_n \Rightarrow \alpha = \pi(n + 1) - iD/4.$$

Окончательно, подставляя сюда выражение для α (5.25) и k (5.20), выраженные через энергию состояния $\tilde{E}_n = E_n - i\Gamma_n/2$, получаем

$$\int_0^a \sqrt{2m(E_n - i\Gamma_n/2 - U(x))} dx = \pi\hbar(n + 3/4) - i\hbar D_n/4.$$

Вычитая это выражение из (5.26а), получим с учетом малости Γ_n

$$\begin{aligned} & \int_0^a \sqrt{2m(E_n - U(x))} dx - \int_0^a \sqrt{2m(E_n - i\Gamma_n/2 - U(x))} dx = \\ & \frac{i\Gamma_n}{4} \frac{d}{dE_n} \int_0^a \sqrt{2m(E_n - U(x))} dx = -\frac{i\Gamma_n}{4} \int_0^a \frac{2m dx}{\sqrt{2m(E_n - U(x))}} = \frac{i\Gamma_n}{4} \cdot T_{\text{кл}}, \end{aligned}$$

т.е. (время жизни τ равно классическому периоду $T_{\text{кл}}$, делённому на вероятность D_n ухода через барьер при однократном подходе к барьеру)

$$\Gamma_n = \frac{\hbar D_n}{T_{\text{кл}}} \Rightarrow \tau = \frac{T_{\text{кл}}}{D_n}. \quad (5.33)$$

◆ *Модель α -распада.* Рассмотренная задача дает стандартное решение задачи об α -распаде атомного ядра. Здесь предполагается, что в ядре есть α -частица. Рассматривается ее радиальное движение. Потенциал ядра для этого движения аппроксимируется прямоугольной (радиальной) ямой радиуса a . Первоначальный заряд ядра Ze . При $r > a$ потенциал – это энергия взаимодействия вылетевшей α -частицы с ядерным остатком. Если $b \rightarrow \infty$, то α -частица находится в обычном стационарном состоянии с $E = E_1$. Конечность барьера приводит к конечному времени жизни $\tau \neq \infty$. Получающееся выражение дает связь между временем жизни ядра и энергией α -частицы (теория Гамова). Эта связь проверена опытом для времен от долей секунды до миллиардов лет!

5.4. Задачи

1. Покажите, что при добавлении к потенциалу отрицательной добавки в любой области энергия основного состояния понижается. Используйте (5.1).
2. С помощью вариационного метода найти энергию и волновую функцию основного состояния, используя пробные функции

$$(\alpha) Ce^{-x^2/2a^2}; \quad (\beta) Ce^{-|x|/a}; \quad (\gamma) \begin{cases} 0 & \text{при } |x| > a, \\ 1 - |x|/a & \text{при } |x| < a. \end{cases}$$

- (a) для гармонического осциллятора, пробные функции α и β ;
- (b) для ангармонического осциллятора $U = \frac{m\omega^2 x^2}{2} + \epsilon x^4$, пробная функция α ;
- (c) для ямы $U = -G\delta(x)$, пробные функции α , β и γ .
- (d) для поля $U(x) = U_0|x|$, пробная функция β .

3. Вычислите в первом исчезающем приближении поправки к уровням под действием возмущения V в следующих полях U :

$$(a) U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

$$(\alpha) V = bx^3, \quad (\beta) V = cx^4, \quad (\gamma) V = f|x|, \quad (\delta) V = \lambda x^5 + \beta bx^6;$$

$$(b) U(x, y) = \frac{m\omega^2(x^2 + y^2)}{2}; \quad V = \alpha xy;$$

$$(c) U(x) = \begin{cases} 0 & \text{при } |x| < a, \\ \infty & \text{при } |x| > a \end{cases} \quad (\alpha) V = G\delta(x), \quad (\beta) V = C \cos(2\pi x/a);$$

$$(d) \hat{H}_0 = \frac{\hat{L}_z^2}{2I}; \quad (\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}); \quad V = V_0 \cos(\varphi - \alpha);$$

(e) $U(\vec{r}) = m\omega^2\vec{r}^2/2; \quad V = \gamma x^2y^2.$

(f) $U(x, y) = \frac{m\omega^2(4x^2 + y^2)}{2}; \quad V = axy^2$ (резонанс Ферми).

Найти поправки к трем нижним уровням.

4. Найти уровни энергии частица в поле $V = -(G + \delta G)\delta(x - a) - (G - \delta G)\delta(x + a)$ при $G \gg \delta G$. Рассмотреть ещё случай $2mGa/\hbar^2 \ll 1$.
5. Рассмотрим осциллятор $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + m\omega^2x^2/2$ с возмущением $V = \gamma x^3$. Как меняется среднее значение координаты $\langle x \rangle$ с ростом энергии уровня? Свяжите ответ с задачей о расширении твёрдого тела.
6. Изобразите качественно типичную зависимость уровней от параметра ξ при переходе через точку $\tilde{V}_{11} = \tilde{V}_{22}$ для задачи о "пересечении уровней", обсуждавшейся в конце раздела 5.2.3.

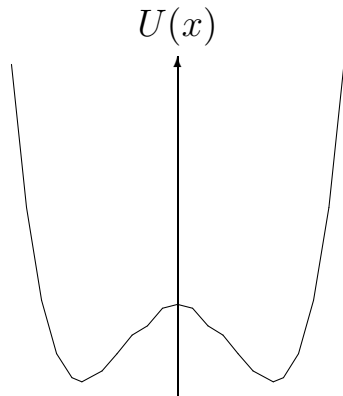
В последующих задачах условие квазиклассичности предполагается выполненным, и решение предлагается искать в квазиклассическом приближении (кроме задач с дополнительным указанием).

7. Найти уровни энергии и волновые функции:
 - а) для осциллятора;
 - б) для частицы в поле тяжести над непроницаемой плитой;
 - в) для атома водорода.
8. Оценить число уровней в яме с потенциалом $U(x)$ при

$$(a) U = \frac{g^2}{r}e^{-r/a}, \quad \begin{pmatrix} b \\ c \end{pmatrix} U = \frac{k(x^2 - a^2)}{2} \cdot \begin{cases} \theta(a - |x|), \\ \theta(a - x)\theta(x), \end{cases}$$

$$(d) U = f(|x| - a)\theta(a - |x|), \quad (f) U = \left(\frac{\beta}{a} - \frac{\beta}{x}\right)\theta(a - x)\theta(x).$$

9. *Двойная яма.* Поле $U(x)$ представляет собой две симметричные потенциальные ямы, разделенные не очень высоким барьером (см. рисунок). Если бы барьер был непроницаем (бесконечно высок), то существовали бы состояния, отвечающие движению частицы в одной из ям и одинаковые для каждой ямы. Возможность перехода через барьер приводит к расщеплению каждого этих состояний на два (аналог – биения в системе двух связанных одинаковых маятников). В этих состояниях частица живет одинаково долго в каждой из ям.



- (a) Определить расщепление энергий ΔE в этой паре состояний и

построить соответствующие волновые функции по известным функциям задачи с непроницаемым барьером.

(б) Показать, что если частица в начальный момент находится в правой яме (т.е. в собственном состоянии такой изолированной ямы $\psi(t=0) = \psi_0(x)$), то через время $\pi\tau/2$ она окажется в левой яме (здесь $\tau = 2\hbar/\Delta E$), т.е.

$$\psi(x, t) = e^{-iE_0t/\hbar}[\psi_0(x) \cos(t/\tau) + i\psi_0(-x) \sin(t/\tau)].$$

10. Найдите положение и ширину квазистационарных уровней в полях

$$V = (a) \begin{cases} -V_1 & \text{при } |x| < a, \\ V_2 & \text{при } a < |x| < a + b, \\ 0 & \text{при } |x| > a + b, \end{cases} \quad (b) \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0, \\ 0 & \text{при } 0 < x < a, \\ V & \text{при } a < x < a + b, \\ 0 & \text{при } x > a + b, \end{cases}$$

$$(c) a|x| - bx^2, \quad (d) \begin{cases} a|x| & \text{при } |x| < l, \\ al + bl^2 - bx^2 & \text{при } |x| > l, \end{cases}$$

$$(e) \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0 \\ G\delta(x-a) & \text{при } x > 0, \end{cases} \quad (f) \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0, \\ 0 & \text{при } 0 < x < a, \\ \beta/x^2 & \text{при } x > a. \end{cases}$$

Для потенциала (а) сравнить с точным решением, вычислить также коэффициент прохождения, считая, что при $b \rightarrow \infty$ появляется уровень энергии $E_n > 0$. При конечном b рассмотреть поведение коэффициента прохождения для небольших $|E - E_n|$. Показать, что этот коэффициент обращается в бесконечность при $E = E_n - i\Gamma_n/2$. Найти Γ_n и сравнить с выражением (5.33). Для потенциала (б) считать $V \gg \hbar^2/(2ma^2)$ так, что уровни можно оценивать как в очень глубокой яме. Для потенциала (е) обсудить случай малопроницаемого барьера $G \gg \hbar^2/ma$.

11. Найти коэффициент прохождения в поле $U(x) = -m\omega^2 x^2/2$.

12. Показать, что для α -частиц, движущихся в потенциале

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

при $E \gg \beta/a$ выполняется закон Гейгера–Неттола $\ln T = A + B/\sqrt{E}$, и найти коэффициенты A и B .

13. Оценить время жизни при α -распаде ядра с зарядом Ze и радиусом ядра 1 fm . Использовать характерные значения для U^{235} : $E \approx 2 \text{ МэВ}$, $U_{\max} - E \approx 12 \text{ МэВ}$, расстояние между точками поворота $b - a \approx 3 \cdot 10^{-12} \text{ см}$. Сравнить с известным периодом полураспада U^{235} , равным 4,5 млрд лет.
14. Рассмотрите прохождение волны над потенциальной ямой (барьером) при условиях: $E \gg E_{\text{тип}} \equiv \hbar^2/2ma^2$, $(E + V)/E \gg 1$:

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

Покажите, что вблизи n -го максимума коэффициент прохождения

$$B(E) \propto \frac{1}{(E - E_n + i\Gamma/2)}; \quad \Gamma \approx 4\sqrt{EE_{\text{тип}}}. \quad (5.34)$$

При этом поведение кривых вблизи каждого максимума описывается независимыми кривыми обычного резонансного вида. В этом случае говорят о **виртуальном уровне**, Γ – его ширина (ср. (2.24)).
Определить время задержки на таком барьере для волнового пакета с $\langle E \rangle \approx E_n$, $\langle \Delta E \rangle \ll \Gamma$.

Глава 6

ПЕРИОДИЧЕСКОЕ ПОЛЕ

Значительную часть вопросов физики твердого тела можно понять, рассматривая линейные периодические цепочки (одномерный кристалл) и движение частиц в них. Они и изучаются в этой главе.

6.1. Основные понятия

Мы изучаем линейную цепочку с периодом (*постоянной решетки*) a при очень большом числе N повторяющихся элементов – *элементарных ячеек* в пределе $N \rightarrow \infty$. Этот предельный переход не тривиален.

Состояния частиц в решетке конечных размеров – стоячие волны (и волны, затухающие при отходе от границ). Различные возможные условия на границах определяют разные фазовые соотношения, возможные в этих волнах. В то же время число ячеек в наблюдаемых решётках обычно чудовищно велико, и естественно надеяться, что физические результаты практически не зависят от деталей граничных условий. Поэтому обычно рассматривают переход к бесконечной решётке, считая, что для любой функции $f(n)$, определённой на решётке, выполняется условие периодичности $f(n+N) = f(n)$. Тогда переход $N \rightarrow \infty$ не встречает трудностей.

Обозначим координату "начала" n -й ячейки через $x_n \equiv na$.

Наша решетка не меняется при сдвиге на величину постоянной решетки a – *инвариантна по отношению к таким сдвигам*. Поэтому можно выбрать стационарные состояния системы, которые являются собственными функциями оператора конечного сдвига $T_a = \exp(ia\hat{p}/\hbar)$ (1.24):

$$\hat{T}_a \psi(x) \equiv \psi(x + a) = \lambda_T \psi(x). \quad (6.1)$$

Выясним теперь, какие значения может принимать величина λ_T в периодической или бесконечной решётке.

Если $|\lambda_T| \neq 1$, то вероятности пребывания в соседних ячейках решетки различны, а это противоречит инвариантности относительно сдвигов. (Например, для $|\lambda_T| < 1$ амплитуда в точке $x - Ka$ с ростом K неограниченно возрастает!). Поэтому должно быть $|\lambda_T| = 1$, и можно записать

$$\lambda_T = e^{iqa}. \quad (6.2a)$$

Это – определение величины q . Величину $\hbar q$ называют *квазиимпульсом* состояния с фактором периодичности λ_T (мы используем это название и для величины q). По определению, изменение q на величину, кратную $2\pi/a$ не меняет фактора периодичности λ_T . Поэтому физически осмысленный интервал изменения квазиимпульса имеет длину $2\pi\hbar/a$. Принято определять его в интервале $(-\pi\hbar/a, \pi\hbar/a)$.

Рассмотрим теперь случай, когда конечность числа ячеек N не нарушает инвариантности относительно сдвигов. Это возможно, если наша цепочка – кольцо. При этом для классической величины $u(n)$ и волновой функции $\psi(x)$ на решетке выполняется условие периодичности

$$u(n + N) = u(n) \equiv u(x_n), \quad \psi(x_n + Na) = \psi(x_n). \quad (6.2b)$$

Подстановка сюда (6.1) показывает, что в этом случае реализуются только такие значения квазиимпульса, для которых

$$\lambda_T^N \equiv e^{iqNa} = 1 \Rightarrow q = \frac{2\pi r}{Na}, \quad r - \text{целое}, \quad \in \left(-\frac{N}{2}, \frac{N}{2}\right). \quad (6.2c)$$

Таким образом, **число различных значений квазиимпульса (в дальнейшем – число уровней в зоне) совпадает с числом элементарных ячеек кристалла N** . Т.к. это число обычно очень велико, говорят о непрерывном изменении q в интервале

$$(-\pi/a, \pi/a). \quad (6.2d)$$

При соударениях "частиц" квазиимпульс сохраняется почти так же, как и обычный импульс при столкновении обычных частиц. Есть, однако, и одно важное отличие: Если полученная сумма $\hbar q_1 + \hbar q_2$ превосходит величину $\pi\hbar/a$, то за сумму принимается величина $\hbar q_1 + \hbar q_2 - 2\pi\hbar/a$. Аналогично, если полученная сумма $\hbar q_1 + \hbar q_2$ меньше величины $-\pi\hbar/a$, то за сумму принимается величина $\hbar q_1 + \hbar q_2 + 2\pi\hbar/a$. Такие сложения импульсов называют сложением *с перебросом*.

• Перепишем собственную функцию оператора конечного сдвига в виде $\psi = e^{iqx}u_q(x)$. Тогда из (6.1), (6.2) следует, что функция $u_q(x)$ (*блеховская амплитуда*) – периодическая функция:

$$\psi = e^{iqx}u_q(x); \quad u_q(x+a) = u_q(x), \quad \left(\int_0^a |u_q(x)|^2 dx = 1 \right). \quad (6.3)$$

(Здесь выписана также обычная нормировка блеховских амплитуд — на ячейке.) Таким образом, собственные состояния оператора конечного сдвига представляют собой плоские волны, распространяющиеся направо ($q > 0$) или налево ($q < 0$), эти волны модулированы периодической амплитудой $u_q(x)$. Волновое число этих волн задается квазиимпульсом q , границы изменения которого конечны – в отличие от обычного импульса. При переходе к пределу $a \rightarrow 0$ мы возвращаемся к системе обычных плоских волн – собственных функций оператора импульса.

Функции Блоха $e^{iqx}u_q(x)$ представляют собой полный набор, по которому можно разложить произвольную волновую функцию:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q b_q e^{iqx} u_q(x). \quad (6.4)$$

При вторичном квантовании (разд. 11.1.2) коэффициент b_q приобретает смысл оператора рождения электрона или уничтожения дырки.

• Чтобы построить описание конечной кольцевой цепочки, используется условие периодичности вида (6.1) с фиксированным набором фаз (6.2с). Так удастся увидеть, например, многие свойства молекулы бензола ($N=6$).

6.2. Движение в периодическом поле

Начнём с изучения движения электрона в "замороженной" кристаллической решетке, т.е. в периодическом поле

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x); \quad U(x+a) = U(x). \quad (6.5)$$

Гамильтониан коммутирует с оператором сдвига \hat{T}_a (1.24). В таком поле существуют стационарные состояния, являющиеся собственными функциями оператора сдвига – с определенным квазиимпульсом q . С учетом (6.3) соответствующие уравнения имеют вид:

$$\hat{H} e^{iqx} u_q(x) = E(q) e^{iqx} u_q(x); \quad \hat{T}_a \psi_{Eq} = e^{iqa} \psi_{Eq}. \quad (6.6)$$

Запишем уравнение, комплексно сопряжённое к (6.6) и уравнение для состояния, которое получается из исходного заменой $q \rightarrow -q$:

$$\hat{H}^+ e^{-iqx} u_q^*(x) = E(q) e^{-iqx} u_q^*(x), \quad \hat{H} e^{-iqx} u_{-q}(x) = E(-q) e^{-iqx} u_{-q}(x).$$

Поскольку \hat{H} – эрмитов оператор ($\hat{H}^+ = \hat{H}$), эти уравнения показывают, что $u_{-q}(x)$ и $u_q^*(x)$ – общие собственные функции гамильтониана и оператора конечного сдвига. Поэтому эти функции совпадают, имеют место соотношения (*теорема Крамера*):

$$E(-q) = E(q), \quad u_{-q}(x) = u_q^*(x). \quad (6.7)$$

Таким образом собственные состояния гамильтониана двукратно вырождены. Выбор знака q снимает вырождение.

Мы увидим, что в периодическом поле допустимые значения энергии образуют *разрешенные зоны* шириной ΔE_k , разделенные областями энергий, которые частицы иметь не могут (*запрещенные зоны*). Вы видели, как это происходит, изучая в терминальном классе системы уровней в наборе повторяющихся одинаковых ям.

Решая уравнение Шредингера, мы находим зависимость энергии E от квазиимпульса (закон дисперсии). Обычно значение $q = 0$ соответствует верхнему или нижнему краю зоны. Поскольку $E(q) = E(-q)$ (6.7), то при $qa \ll 1$ можно записать разложение:

$$E(q) = E_0 + \hbar^2 q^2 / 2m^* . \quad (6.8)$$

Здесь m^* – коэффициент, который по естественной аналогии называют *эффективной массой*. Если $m^* < 0$, говорят об отрицательных массах – *дырках*. В кристаллах реализуются случаи $m^* \approx 0.05m_e$ и $m^* \approx 100m_e$, но чаще m^* не сильно отличается от массы свободного электрона m_e . Заметим, что при описании движения в периодическом поле нельзя сказать, что при $x \rightarrow \pm\infty$ потенциал $U \rightarrow 0$, т.к. здесь исчезают специальные причины для выбора начала отсчета потенциала.

Для грубой оценки можно считать, что закон дисперсии (6.8) справедлив во всей зоне, и тогда эффективная масса и характерное время движения между ячейками t_k по порядку величины составляют

$$|m_k^*| \sim \frac{\hbar^2/a^2}{\Delta E_k}, \quad t_k \sim \frac{\hbar}{\Delta E_k}. \quad (6.9)$$

Рассмотрим теперь два важных примера.

■ **Слабое периодическое поле** удобно разложить в ряд Фурье

$$V = \sum_n (V_n e^{irnx} + V_n^* e^{-irnx}) \quad \left(r = \frac{2\pi}{a}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \right). \quad (6.10)$$

Для начала мы рассмотрим простейший случай, когда только $V_1 \neq 0$ и начало отсчёта выбрано так, что $V_1 = V_1^*$ ("косинусный" потенциал).

Поле можно считать слабым, если характерная энергия V_1 мала по сравнению с расстоянием между уровнями. Но в случае бесконечной решётки спектр энергий непрерывен, и слова "слабое поле" на первый взгляд теряют смысл. Чтобы вернуть этот смысл, представим, что система помещена в ящик размера L (с дискретными уровнями энергии и периодическими граничными условиями) так что $|V_1| \ll \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$. Тогда можно использовать формулы теории возмущений для дискретного спектра, а в конце перейти к пределу $L \rightarrow \infty$.

В этой задаче квазиимпульс почти неотличим от импульса (за исключением пределов изменения). Невозмущённые волновые функции – это плоские волны e^{ikx} для состояний с энергией $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$. Согласно формулам теории возмущений без вырождения (5.9), первая поправка к энергии под действием возмущения (6.10) обращается в нуль, и энергии состояний меняются лишь во втором порядке:

$$E(k) \rightarrow \tilde{E}(k) = E(k) + \frac{V_1^2}{E(k) - E(k-r)} + \frac{V_1^2}{E(k) - E(k+r)}.$$

Но если $k \approx \pm r/2$, один из знаменателей становится малым. В этом случае система *близка к вырождению*, и следует рассмотреть пару близко расположенных (резонирующих) уровней $|k\rangle$ и $|k-r\rangle$ (см. разд. 5.2.3). Воспользовавшись (5.16), получим взамен $E(k)$ и $E(k-r)$ пару уровней:

$$\tilde{E}_{\pm}(k) = \frac{E(k) + E(k-r) \pm \sqrt{(E(k) - E(k-r))^2 + 4V_1^2}}{2}. \quad (6.11)$$

При $k = 0$ мы имеем $\tilde{E}_+(0) = (E(r) + \sqrt{E^2(r) + 4V_1^2})/2$ и $\tilde{E}_-(0) = -V_1^2/\tilde{E}_+(0)$. С ростом k энергия $\tilde{E}_+(k)$ уменьшается, а энергия $\tilde{E}_-(k)$ увеличивается. При $k = r/2$ энергия $\tilde{E}_+(k)$ достигает максимума $\tilde{E}_+(r/2) = E(r/2) + |V_1|$, а энергия $\tilde{E}_-(k)$ достигает минимума $\tilde{E}_-(r/2) = E(r/2) - |V_1|$, а энергия $\tilde{E}_-(k)$ – максимума $\tilde{E}_-(r/2) = E(r/2) - |V_1|$. С дальнейшим ростом k энергия $\tilde{E}_+(k)$ растёт, а энергия $\tilde{E}_-(k)$ падает так, что $\tilde{E}_+(r) = \tilde{E}_+(0)$ и $\tilde{E}_-(r) = \tilde{E}_-(0)$.

Итак, значения энергии от $\tilde{E}_-(0)$ до $\tilde{E}_-(r/2)$ образуют *разрешенную зону*, а от $\tilde{E}_-(r/2)$ до $\tilde{E}_+(r/2)$ – *запрещённую зону* (шириной $2|V_1|$).

Из (6.11) видно, что при $k \rightarrow r/2$ групповая скорость обращается в нуль, $(1/\hbar)d\tilde{E}(k)/dk \rightarrow 0$. Иными словами, на краю зоны групповая скорость обращается в нуль – в полном соответствии с теоремой Крамерса (6.7), вблизи этого края работает разложение (6.8), и можно вводить понятие эффективной массы. *Проверьте, что*

$$m^* = m \frac{|V_1|}{\hbar^2 r^2 / 2m + |V_1|}. \quad (6.12)$$

◇ Чтобы увидеть запрещенные зоны вблизи $E(k) = E(nr/2)$ с целым $n > 1$, надо обращаться к более высоким порядкам теории возмущений и к вкладам более высоких гармоник потенциала V_s , где появятся энергетические знаменатели типа $E(k) - E(k - nr)$.

■ Периодическое поле из δ -ям.

Другой предельный случай доставляет нам описание движения частицы в поле "забора" из δ -ям:

$$U(x) = -G \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + na). \quad (6.13)$$

Найдем те решения уравнения Шредингера, которые являются и собственными функциями оператора конечного сдвига \hat{T}_a . Обозначим

$$\varkappa = \sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}} \text{ при } E < 0, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ при } E > 0, \quad k_0 = \frac{2mG}{\hbar^2}.$$

При $E < 0$ в области $0 < x < a$ решения – линейные комбинации соответствующих решений для свободного движения $e^{\varkappa x}$ и $e^{-\varkappa x}$. В нашей задаче удобна следующая форма этой комбинации:

$$\psi_q(x) = A \operatorname{sh} \varkappa(a - x) + B \operatorname{sh} \varkappa x. \quad (6.14)$$

Запишем это решение для области $a < x < 2a$ в виде $\psi_q(x) = e^{iqa} \psi_q(x - a)$ (отсчёт от левой ямы). Из непрерывности волновой функции в точке a получается, что $B = A e^{iqa}$. Далее, из условия сшивки в форме (2.16) следует закон дисперсии (вторая строчка получена повторением предыдущего рассмотрения для $E > 0$):

$$\cos qa = \begin{cases} ch \varkappa a - \frac{k_0}{2\varkappa} sh \varkappa a & \text{при } E < 0; \\ \cos ka - \frac{k_0}{2k} \sin ka & \text{при } E > 0. \end{cases} \quad (6.15)$$

Эти уравнения имеют решения, если правая часть по модулю не превосходит 1. Анализируя эти соотношения, *убедитесь в следующем*:

1. Всегда есть решение при $\kappa = k_0/2$.
2. При $k_0a < 4$ разрешённая зона включает точку $E = 0$, а при $k_0a > 4$ – не включает.
3. При увеличении энергии в системе чередуются разрешенные и запрещенные зоны. С ростом энергии ширины запрещенных зон убывают (как $k_0a/\pi n$).

(6.16)

Другие важные свойства возникающей зонной структуры обсуждаются в задачах к этой главе.

■ Качественная картина

Возникновение зонной структуры связано с двумя механизмами.

- Наиболее важный механизм образования зон – *обобществление состояний* множества одинаковых ям, составляющих решётку (вы наблюдали это в терминальном классе). Рассмотрим сначала уединённую яму, отвечающую одной ячейке решетки. Пусть в ней существуют уровни энергии (сверху – вниз) $-E_1, -E_2, \dots, -E_k$ (в реальных кристаллах это – электронные уровни энергии в ионах, в типичном случае энергия E_1 – порядка 1 эВ, E_2, E_3, \dots составляют десятки и сотни эВ). Если поместить рядом, на расстоянии a , ещё одну точно такую же яму, то из-за туннелирования между ними каждый уровень расщепится на два, как это обсуждалось, например, в задаче 5.9 (и как вы видели в терминальном классе). Величина расщепления ΔE_k связана с *коэффициентом туннелирования между ямами* D_k соотношением

$$\Delta E_k \sim D_k |E_k|, \quad D_k \approx \exp\left(-2 \int \sqrt{2m|E_k - V|} dx / \hbar\right), \quad (6.17)$$

где интеграл берётся по области между точками поворота соседних ям ($\lesssim a$). Состояния, отвечающие этим уровням, не локализованы вблизи одной из ям, а распределены между ямами (для двух ям одно из состояний симметрично, а другое антисимметрично по переходу между ямами).

При добавлении третьей, четвёртой, ... таких же ям полное число уровней сохраняется так, что каждый из "родительских" уровней расщепляется на 2, 3, ... уровня в пределах того же интервала энергий $\sim \Delta E_k$, т.е. появляются "зоны". Собственные состояния, отвечающие каждому из этих значений энергии, распределены по всем ямам одновременно.

В решетке с N элементарных ячеек каждая зона содержит N уровней. Верхние из этих разрешённых зон – относительно широкие, а нижние – очень узкие, поскольку для них коэффициент туннелирования D_k очень мал¹. Действительно, в коэффициенте туннелирования D_k интеграл распространяется по области между точками поворота квазиклассического движения внутри отдельных ям. Для уровней, начиная с E_2 область квазиклассического движения вблизи каждой из ям становится очень небольшой, и расстояние между точками поворота соседних ям становится очень близким к расстоянию между ионами (параметру решётки) a . В большей части этой области $|E_k| \gg |V|$, поэтому в оценках можно считать $D_k \approx \exp(-2a\sqrt{2m|E_k|}/\hbar)$. В частности, для Al и Si объём одного грамм-атома составляет примерно 10 см^3 . Поэтому среднее межатомное расстояние в таком кристалле составляет примерно $2.5 \cdot 10^{-8}$ см. Для энергии $E_k \approx 10$ эВ величина $\hbar/\sqrt{2mE}$ составляет $0.6 \cdot 10^{-8}$ см. Поэтому для такой энергии уровня $D_k \approx e^{-8} \approx 0.0003$, что даёт очень малую ширину зоны $\Delta E_k \approx 0.003$ эВ. Точно так же, при переходе к более глубокому уровню с энергией -100 эВ ширина зоны составит ничтожно малую величину $\Delta E \sim 10^{-9}$ эВ. Таким образом, набор разрешённых энергий глубоко расположенных зон практически не отличается от N кратно тиражированного набора энергий уровней изолированных ионов.

Обсудим теперь локализацию электрона в решётке, руководствуясь результатами решения задачи для пары ям 5.9. Если электрон первоначально локализован вблизи одного из ионов, его состояние есть суперпозиция чистых состояний, отвечающих определённым значениям энергии. Электрон смещается к другому иону за время $t_k \approx \hbar/\Delta E_k$ (6.9), которое становится очень большим для глубоко расположенных уровней.

Таким образом, для этих состояний концепция локализованных состояний адекватно описывает ситуацию. Концепция Блоховских волн, бегущих по решётке, адекватно описывает ситуацию для верхних зон.

- Наши примеры вычисления зонной структуры показывают также, что периодичность потенциала приводит к возникновению узких запрещённых зон ещё и высоко в пределах непрерывного спектра – подобно дифракционным максимумам высокого порядка при дифракции на бесконечной периодической решётке. В идеальном случае эти запрещённые зоны простираются до очень высоких энергий. В действительности, при

¹ При этом эффективные массы "электронов" в глубоко расположенных зонах и времена движения между ячейками t_k (6.9) становятся чудовищно большими.

достаточно больших энергиях эти запрещённые зоны исчезают из-за конечности размеров кристалла и небольших нарушений периодичности.

■ Моделирование на компьютере

Задача о периодической решетке моделируется на компьютере. Повторяющаяся ячейка строится из прямоугольных ям и барьеров. При этом для каждой энергии слева задается общее решение, например, $A \sin kx + B \cos kx$ (а не убывающее или уходящее направо, как делалось для конечной системы ям). Далее с помощью условий сшивки (2.14) на границах производится переход к следующей ячейке, и отыскиваются коэффициенты A' и B' такого же решения при $x > a$, $A' \sin kx + B' \cos kx$. Эти коэффициенты A' , B' выражаются через A , B также и с помощью условия инвариантности относительно конечного сдвига (6.1), $A' = e^{iqa} A$, $B' = e^{iqa} B$. Получающиеся соотношения составляют уравнение для определения квазиимпульса q при заданной энергии E (или зависимости E от q). Для значений энергии, принадлежащих запрещённой зоне, это уравнение не имеет решения.

6.3. Малые колебания линейных цепочек

При нулевой температуре можно считать грубо, что все ионы кристалла находятся в равновесии, их потенциальные энергии минимальны, и малые отклонения от равновесия увеличивают эти энергии на величины, пропорциональные квадратам смещений. Поэтому разумной моделью кристалла является система грузиков, отвечающих ионам, и пружинок, отвечающих возвращающим силам. Массы грузиков отвечают массам ионов, а "жесткости" возвращающих сил определяются взаимодействием ионов и их электронного окружения друг с другом. Ниже говоря об ионах, мы имеем в виду именно такую механическую модель.

Чтобы понять основные черты возникающей картины, мы ограничимся в расчётах изучением одномерной задачи, т.е. рассмотрим цепочку из большого числа N одинаковых молекул (состоящих из одного или двух атомов), расположенных вдоль оси x и двигающихся вдоль этой оси.

6.3.1. Цепочка одноатомных "молекул".

В задаче о простейшем кристалле рассматривается цепочка ионов массы m , связанных пружинками одинаковой жесткости $k = m\omega_0^2$. В равно-

веса ионы расположены в точках $x_n = na$ (n – целые). Их смещения от положений равновесия обозначаем через $u_n \equiv u(x_n)$.

Здесь элементарной ячейкой можно считать один ион и одну "пружинку" (например, слева от иона) или ион и половинки пружинок, связанных с ним, или пружинку и половинки ионов, связанных с ней. Результат не зависит от выбора, но важно, чтобы этот выбор не менялся в процессе рассмотрения задачи.

■ Классическое рассмотрение.

Полная энергия системы (*функция Гамильтона* – гамильтониан) есть

$$\begin{aligned} H &= \sum_n \left[\frac{p_n^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2} (u_n - u_{n+1})^2 \right] \\ &\equiv \sum \left[\frac{p_n p_n^*}{2m} + \frac{m\omega_0^2 (u_n - u_{n+1})(u_n^* - u_{n+1}^*)}{2} \right]. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Вторая запись здесь не содержит ничего нового, т.к. импульсы и смещения действительны, но она удобна для дальнейших преобразований.

Разложим координаты и импульсы ионов по собственным функциям оператора конечного сдвига для решетки из N ионов с периодическими граничными условиями. В нашем случае это – просто преобразование Фурье (с учётом того, что $q = 2\pi r/(Na)$ (6.2с)) (обратите внимание на разные знаки показателей экспонент для координаты и импульса):

$$\begin{aligned} U(q) &= \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{n=-N/2}^{N/2} u_n e^{iqx_n}, \quad u_n = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q U(q) e^{-iqx_n}; \\ P(q) &= \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_{n=-N/2}^{N/2} p_n e^{-iqx_n}, \quad p_n = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q P(q) e^{iqx_n}. \end{aligned} \quad (6.19)$$

При этом

$$u_n - u_{n+1} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q U(q) e^{-iqx_n} (1 - e^{-iqa}).$$

Определенные здесь величины $U(q)$, $P(q)$ комплексны и

$$U^*(q) = U(-q), \quad P^*(q) = P(-q). \quad (6.20)$$

Подставим эти выражения во вторую форму функции Гамильтона (6.18). С учётом условий ортонормированности для преобразований Фу-

рье в этом представлении функция Гамильтона диагонализуется²:

$$H = \frac{1}{N} \sum_q \mathcal{H}(q) \Rightarrow \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq \mathcal{H}(q), \quad (6.21)$$

$$\mathcal{H}(q) = \frac{P(q)P^*(q)}{2m} + \frac{2m\omega_0^2(1 - \cos qa)U(q)U^*(q)}{2}.$$

(Величину $\mathcal{H}(q)$ называют плотностью гамильтониана в импульсном пространстве.) Гамильтониан колеблющейся решетки превратился в сумму гамильтонианов невзаимодействующих осцилляторов $\mathcal{H}(q)$, т.е. задача свелась к описанию системы независимых осцилляторов – *нормальных колебаний* с частотами

$$\omega \equiv \omega(q) = 2\omega_0 |\sin(qa/2)|. \quad (6.22a)$$

Здесь имеется вырождение по знаку q – в полной аналогии с теоремой Крамерса. Видно, что при небольших q с хорошей точностью

$$\omega(q) = Cq; \quad C = \omega_0 a. \quad (6.22b)$$

Это соответствует звуковым волнам со скоростью C .

Собственные векторы, отвечающие разным квазиимпульсам – *нормальные колебания* – бегущие волны (6.19).

◇ Приведём также более привычный для некоторых вывод с **прямым использованием законов Ньютона**.

На n -й ион действуют возвращающие силы $m\omega_0^2[u(n) - u(n-1)]$ со стороны $(n-1)$ -го иона и $m\omega_0^2[u(n) - u(n+1)]$ – со стороны $(n+1)$ -го иона. По второму закону Ньютона отсюда получается ускорение

$$u(n)'' = \omega_0^2[u(n+1) + u(n-1) - 2u(n)]. \quad (6.23)$$

Это – система линейных уравнений. Ищем её решения в виде

$$u(n) = \text{Re} (e^{i\omega t} f(x_n)). \quad (6.24)$$

Амплитуды $f(x_n)$ могут быть комплексными, и инвариантность по отношению к конечным сдвигам позволяет искать решения в виде собственных функций оператора конечного сдвига (6.1) – (6.2)

$$f(x_{n+1}) = \lambda_T f(x_n) = \lambda_T^n f(x_1) \equiv e^{iqna} f(x_1) \equiv e^{iqx_n} f(x_1).$$

² Представление в виде интеграла отвечает переходу от суммирования к интегрированию при $N \rightarrow \infty$ с $dq = 2\pi/(Na)$ – ср. (6.2с).

Теперь уравнение (6.23) принимает вид

$$\omega^2 = \omega_0^2 (2 - \lambda_T - \lambda_T^{-1}) = 4\omega_0^2 \left(\frac{\lambda_T^{1/2} - \lambda_T^{-1/2}}{2i} \right)^2. \quad (6.25)$$

Мы вновь убеждаемся, что решения с действительным значением ω имеют место при $|\lambda_T| = 1$, т.е. соответствуют определенным значениям квазиимпульса q , $\lambda_T = e^{iqa}$ (6.2). Подстановка этого выражения в (6.25) даёт выражение для скорости звука (6.22b) и собственные векторы (6.19).

■ Квантовое описание

Преобразование Фурье (6.19) не перемешивает координаты и импульсы. Поэтому представление (6.21) получается и в квантовом случае. Кроме того, для компонент Фурье $U(q)$ и $P(q)$ имеют место те же перестановочные соотношения (1.20), что и для отдельных координат и импульсов частиц,

$$[P(q), U(q')] = -i\hbar\delta_{qq'}. \quad (6.26)$$

В итоге для описания состояний каждого из получившихся осцилляторов применимо всё описание раздела 4.1. В частности, по образцу (4.4) можно ввести операторы:

$$\begin{aligned} \hat{b}(q) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{U}(q)}{U_{q0}} + i \frac{\hat{P}^+(q)}{P_{q0}} \right); & U_{q0} &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega(q)}}; \\ \hat{b}^+(q) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{U}^+(q)}{U_{q0}} - i \frac{\hat{P}(q)}{P_{q0}} \right); & P_{q0} &= \sqrt{\hbar m\omega(q)}. \end{aligned} \quad (6.27)$$

При этом

$$\hat{U}(q) = U_{q0} \frac{\hat{b}(q) + \hat{b}^+(-q)}{\sqrt{2}}; \quad \hat{P}(q) = P_{q0} \frac{\hat{b}(-q) - \hat{b}^+(q)}{\sqrt{2}i}. \quad (6.28)$$

Подстановка этих выражений преобразует гамильтониан (6.21) к виду:

$$\hat{H} = \int dq \hbar\omega(q) \left(\hat{b}^+(q)\hat{b}(q) + \frac{1}{2} \right). \quad (6.29)$$

Отсюда немедленно получают квантованные значения энергий нормальных колебаний с частотами $\omega(q)$ (6.22a), $E(q) = \hbar\omega(q)(n_q + 1/2)$ с целыми n_q . Волновые функции вида (4.18) определены в координатах $U(q)$, связь которых со смещениями задается преобразованием (6.19).

Отдельные возбуждения независимых осцилляторов ("виброны" на нашем старом языке) в этом случае называются *фононами*. Это – кванты волн, распространяющихся по решетке, с законом дисперсии, который в нашем случае имеет вид (6.22а). Операторы $\hat{b}(q)$ и $\hat{b}^+(q)$ — операторы уничтожения и рождения фононов данного типа. Здесь применимы все результаты, полученные ранее для линейного осциллятора. В частности, произвольное состояние колебаний нашей цепочки можно определять набором натуральных чисел, обозначающих число фононов в каждом из состояний (вторичное квантование – см. раздел 11.1.2).

◇ Вклад в энергию $(1/2) \int \hbar\omega(q) dq$ в (6.29) отвечает "нулевым колебаниям" осцилляторов и наблюдается в виде размазки положений ионов в решётке даже при нулевой температуре. Из-за этого дифракция рентгеновских лучей на кристалле при очень низких температурах даёт не точки, как должно было бы быть для закреплённых ионов, а пятна, размер которых определяется амплитудой нулевых колебаний.

Внешние воздействия на кристалл не могут изменить этого вклада. Поэтому часто его принимают за начало отсчёта энергии, и отбрасывают в дальнейшем анализе.

Специальная возможность наблюдать подобный вклад – изучение *эффекта Казимира* обсуждается во второй части курса.

6.3.2. Цепочка двухтомных "молекул".

Рассмотрим ещё модель цепочки из двухатомных молекул, состоящих из одинаковых "ионов" массы m , связанных пружинками чередующейся жесткости $k_1 = m\omega_1^2$ и $k_2 = m\omega_2^2$. При $k_1 > k_2$ естественно считать "молекулой" пару ионов, связанную пружинкой жесткости k_1 , а пружинки жесткости k_2 сопоставлять межмолекулярным связям.

■ Обсудим сначала простейшую модель двухатомной молекулы в кристалле: 2 иона, связанных пружинкой k_1 и соединённых со стенками справа и слева пружинками меньшей жесткости k_2 , смещения этих ионов от положения равновесия обозначаются u_1 и u_2 соответственно. Гамильтониан этой "молекулы"

$$\hat{H} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{m\omega_1^2(u_1 - u_2)^2}{2} + \frac{m\omega_2^2(u_1^2 + u_2^2)}{2}. \quad (6.30a)$$

Перейдём к комбинированным смещениям

$$u_{\pm} = (u_1 \pm u_2)/\sqrt{2} \quad (6.30b)$$

и соответствующим импульсам. В этих координатах наш гамильтониан разбивается на сумму гамильтонианов \hat{H}_+ , описывающего движение "молекулы" как целого (движение центра масс), и \hat{H}_- , описывающего относительное движение "атомов" в "молекуле" – симметричные колебания относительно центра тяжести,

$$u_{\pm} = \frac{u_+ \pm u_-}{\sqrt{2}} \Rightarrow \hat{H} = \hat{H}_+ + \hat{H}_-, \quad (6.30c)$$

$$\hat{H}_{\pm} = \frac{p_{\pm}^2}{2m} + \frac{m\omega_{\pm}^2 u_{\pm}^2}{2}; \quad \omega_-^2 = 2\omega_1^2 + \omega_2^2, \quad \omega_+ = \omega_2.$$

Нетрудно проверить, что использованные преобразования сохраняют для новых смещений и импульсов те же перестановочные соотношения (1.20), что и для исходных, ср. (6.26). Поэтому для описания состояний каждого из осцилляторов достаточно повторить сказанное в разделе 4.1.

Мы видим, что частота колебаний "молекулы" как целого ω_+ определяется только жесткостью "внешних" связей "молекулы", она относительно невелика. Частота колебаний расстояния между "ионами" ω_- относительно велика. (У свободной молекулы это были бы обычные колебания с частотой $\omega_1\sqrt{2}$.)

■ Цепочка двухатомных "молекул".

Гамильтониан рассматриваемой цепочки двухатомных "молекул" имеет вид

$$H = \sum_n \left[\frac{p_{2n}^2}{2m} + \frac{p_{2n+1}^2}{2m} + \frac{k_1^2(u_{2n} - u_{2n+1})^2}{2} + \frac{k_2^2(u_{2n} - u_{2n-1})^2}{2} \right]. \quad (6.31)$$

("Пружинки" $(2n) - (2n + 1)$ отвечают связям внутри "молекулы", а "пружинки" $(2n) - (2n - 1)$ – межмолекулярным связям.) Здесь за элементарную ячейку можно принять отрезок от чётного иона до следующего чётного иона, или от нечётного до нечётного, или ... Размер элементарной ячейки мы принимаем равным $2a$ (так что расстояние между соседями составляет a), т.е. мы обозначаем $x_n = 2na$.

Разложение по собственным функциям оператора конечного сдвига (разложение Фурье) вида (6.19) выполняется отдельно для смещений чётных и нечётных частиц:

$$u_{2n} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_n U_{ev}(q) e^{-iqx_n}, \quad u_{2n+1} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_n U_{od}(q) e^{-iq(x_n+a)},$$

$$p_{2n} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q P_{ev}(q) e^{iqx_n}, \quad p_{2n+1} = \sqrt{\frac{1}{N}} \sum_q P_{od}(q) e^{iq(x_n+a)}. \quad (6.32)$$

(Дополнительный сдвиг аргумента у координат нечётной частицы учитывает реальное расстояние между соседями. Обратные преобразования легко выписываются по образцу (6.19)).

Подстановка этих выражений в гамильтониан – в полной аналогии с (6.21) – преобразует его в сумму гамильтонианов пар связанных осцилляторов, отвечающих отдельным значениям квазиимпульса,

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{N} \sum_q \mathcal{H}(q) \Rightarrow \frac{a}{\pi} \int_{-\pi/2a}^{\pi/2a} dq \mathcal{H}(q), \\
\mathcal{H}(q) &= \frac{P_{ev}(q)P_{ev}^*(q)}{2m} + \frac{P_{od}(q)P_{od}^*(q)}{2m} \\
&+ m \frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2} [U_{ev}(q)U_{ev}^*(q) + U_{od}(q)U_{od}^*(q)] \\
&- m \frac{\omega_1^2 + \omega_2^2}{2} \cos(qa/2) [U_{ev}(q)U_{od}^*(q) + U_{od}(q)U_{ev}^*(q)] \\
&+ im \frac{\omega_1^2 - \omega_2^2}{2} \sin(qa/2) [U_{ev}(q)U_{od}^*(q) - U_{od}(q)U_{ev}^*(q)].
\end{aligned} \tag{6.33}$$

Таким образом, гамильтониан преобразован в сумму гамильтонианов систем с двумя степенями свободы каждый, чьи параметры зависят от квазиимпульса q , пробегающего значения (6.2с) (частичная диагонализация). Каждый из этих гамильтонианов напоминает гамильтониан уединённой молекулы (6.30) и обладает теми же свойствами симметрии.

Далее гамильтониан $\mathcal{H}(q)$ преобразуется к диагональной форме

$$\mathcal{H}(q) = \mathcal{H}_+(q) + \mathcal{H}_-(q), \quad \mathcal{H}_\pm(q) = \frac{P_\pm^2}{2m} + \frac{m\omega_\pm^2(q)U_\pm^2(q)}{2} \tag{6.34a}$$

с помощью преобразований (ср. (6.30b))

$$\begin{aligned}
U_\pm(q) &= \frac{U_{ev}(q)e^{i\phi} \pm U_{od}(q)e^{-i\phi}}{\sqrt{2}}, \\
P_\pm(q) &= \frac{P_{ev}(q)e^{-i\phi} \pm P_{od}(q)e^{i\phi}}{\sqrt{2}}.
\end{aligned} \tag{6.34b}$$

Угол ϕ и частоты нормальных осцилляторов определяются стандартным образом (диагонализация квадратичной формы потенциальной энергии):

$$\begin{aligned}
tg2\phi &= \frac{\omega_1^2 - \omega_2^2}{\omega_1^2 + \omega_2^2} tg(qa), \\
\omega_\pm^2 &= \omega_1^2 + \omega_2^2 \mp \sqrt{(\omega_1^2 + \omega_2^2)^2 - 4\omega_1^2\omega_2^2 \sin^2(qa)}.
\end{aligned} \tag{6.34c}$$

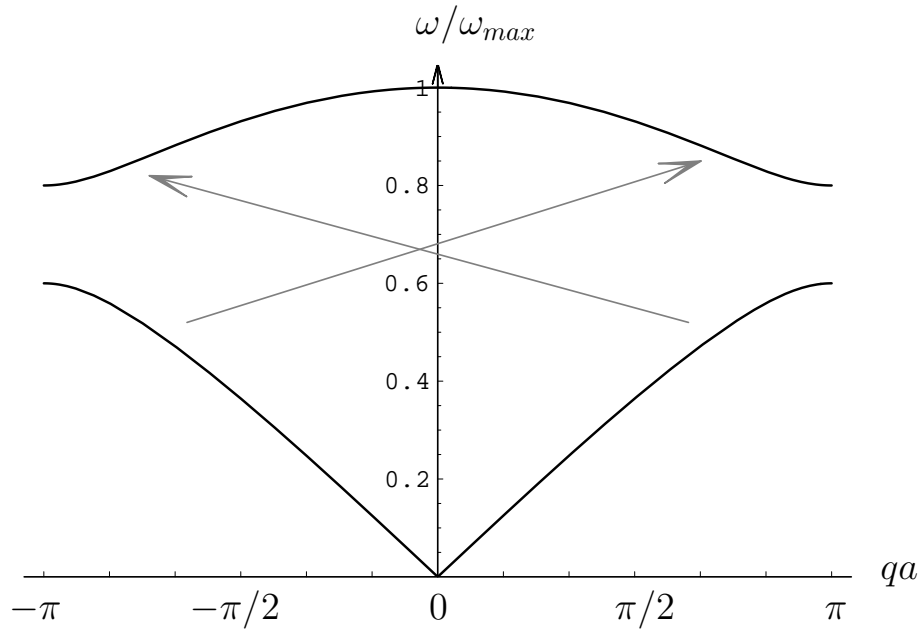


Рис. 6.1. Две ветви колебаний в решётке с двумя типами связей при $\omega_2 = 3\omega_1/4$.

Этот спектр изображен на рис. 6.1.

Нетрудно проверить, что, как и в случае одной молекулы, использованные преобразования сохраняют для новых смещений $U(q)$ и импульсов $P(q)$ те же перестановочные соотношения (1.20), что и для исходных.

◇ При небольших q получается

$$\omega_+^2 \approx \frac{2\omega_1^2\omega_2^2}{\omega_1^2 + \omega_2^2} \sin^2(qa), \quad \omega_-^2 \approx 2(\omega_1^2 + \omega_2^2). \quad (6.35)$$

В соответствии с (6.34b) колебания ω_- – высокочастотные, в этих колебаниях соседние ионы колеблются в противоположные стороны (противофазно). Такие колебания могут возбуждаться электромагнитной волной с длиной волны $\sim a$ – светом. Поэтому они называются оптическими (оптическая ветвь колебаний). С ростом квазиимпульса частота этих колебаний медленно убывает. Напротив, в колебаниях с частотами ω_+ соседние ионы смещаются в одну сторону, среда колеблется как целое. Эти колебания естественно назвать *акустическими*³, т.к. при

³ Существование акустической ветви колебаний – чрезвычайно общий факт. Н.Н. Боголюбов доказал это, предполагая только, что элементарные взаимодействия частиц, образовавших вещество, быстро убывают с расстоянием. Частный случай этого утверждения (открытый несколько позднее) известен ныне как теорема Голдстоуна. Условие теоремы Боголюбова не выполняется в плазме – кулоновское взаимодействие заряженных частиц убывает с расстоянием медленно. В соответствии с этим в полностью ионизированной плазме акустические колебания заменяются на плазменные, у которых наименьшая частота – не нуль.

небольших q их частота пропорциональна квазиимпульсу (скорость звука $C = 2a\omega_1\omega_2/\sqrt{2(\omega_1^2 + \omega_2^2)}$). С ростом квазиимпульса закон дисперсии отклоняется от линейного.

◇ Полезно рассмотреть случай $k_1 \gg k_2$. Тогда закон дисперсии (6.35) для ω_+ переходит в закон (6.22а) с заменой $m \rightarrow 2m$, $k \rightarrow k_2$ для "молекул" массы $2m$, связанных "пружинками" жесткости k_2 . В то же время закон дисперсии (6.35) для ω_- переходит в соотношение $\omega_- = \omega_1\sqrt{2}$ для отдельных молекул. Это – частный случай общего утверждения, что *спектр оптических колебаний воспроизводит спектр собственных колебаний уединённой молекулы с "размазкой"*, которая определяется жесткостью связей.

◇ При $k_2 \rightarrow k_1$ скачком меняется симметрия – размер элементарной ячейки уменьшается вдвое, и наша цепочка превращается в рассмотренную ранее цепочку одноатомных молекул (в которой мы приняли за размер элементарной ячейки $2a$ вместо a). В частности, при этом $\omega_1 = \omega_2 \equiv \omega_0$ имеем $\omega_{\pm}^2 = 2\omega_0^2(1 \pm \cos(qa))$.

Две ветви колебаний получатся в этом случае из дисперсионной кривой для случая одноатомных молекул следующим образом. Поскольку мы удвоили длину элементарной ячейки, интервал изменения квазиимпульса уменьшился вдвое. Поэтому следует считать, что квазиимпульс меняется только в интервале $-\pi/2a < q < \pi/2a$. Часть дисперсионной кривой для одноатомных молекул, расположенная внутри этого интервала, отображается теперь как акустическая ветвь колебаний. В соответствии с определением квазиимпульса, его значения в интервале $\pi/2a < q < \pi/a$ следует рассматривать как $q - \pi/a$, они попадают в интервал $(-\pi/2a, 0)$, а значения квазиимпульса в интервале $-\pi/a < q < -\pi/2a$ следует рассматривать как $q + \pi/a$, они попадают в интервал $(0, \pi/2a)$ (*переброс*). Так возникают две половины оптической ветви в нашем случае. (Переход к случаю $k_2 = k_1$ схематически изображен стрелочками на рисунке.)

■ **Квантовое рассмотрение** повторяет всё, что было сказано для цепочки одноатомных молекул. Единственное отличие состоит в том, что теперь в системе появляется две ветви спектра колебаний рис.6.1 и соответственно два типа операторов рождения и уничтожения, отвечающих акустической и оптической ветвям колебаний (два типа фононов).

6.4. Особенности конечных цепочек

В реальных системах число элементарных ячеек N конечно. В начале главы мы рассмотрели случай периодических граничных условий. Для других граничных условий, например, цепочки с закреплёнными концами решения – возникают стоячие волны – суперпозиции решений для кольцевой цепочки. При этом исчезает вырождение $q \rightarrow -q$, зато точки на кривой $\omega(k)$ расположены вдвое чаще – появляются решения с нечетным числом полувольт, не допускающие гладкого периодического продолжения. Тем не менее, в пределе больших N основные свойства набора частот и закон дисперсии не зависят от точного вида граничных условий.

По настоящему новая черта конечной цепочки это – решения $|\lambda_T| \neq 1$ у уравнения (6.25). Они соответствуют состояниям, амплитуды которых убывают при удалении от одной из границ – *поверхностным состояниям* – *поверхностным уровням* (Таммовским). Такие состояния можно изучать на модели полубесконечной решетки (имеющей только одну границу). Происхождение этих состояний связано с тем, что ямы, отвечающие ионам вблизи поверхности, отличаются от "внутренних". Поэтому туннелирование из этих ям ослаблено, и оказавшиеся здесь электроны не могут уходить далеко от поверхности. Эти уровни можно видеть на компьютерных демонстрациях.

Точно так же и *примесные и вакансионные состояния*, соответствующие локальным включениям в решетку или "пропускам" ионов, локализуются вблизи этих нарушений периодичности.

6.5. Квазичастицы

В реальном кристалле электроны сильно взаимодействуют между собой. На первый взгляд, это делает бесполезным представление об одиноком электроны, путешествующем сквозь периодический потенциал решетки. Оказалось, однако, что в этом случае интересные нас электронные свойства кристалла очень хорошо описываются с помощью понятия о *квазичастицах* – элементарных возбуждениях над основным состоянием всего коллектива составляющих кристалл частиц. При не слишком высоких температурах таких квазичастиц не много, и они слабо взаимодействуют между собой. Основные черты энергетического спектра квазичастиц определяются периодичностью кристалла, т.е. сов-

падают с теми, которые мы только что рассмотрели.

Упомянем некоторые типы квазичастиц в твердом теле, способных распространяться по всему кристаллу (мы говорим о части из них во второй половине курса):

1. *Электроны и дырки* – возбуждения, подобные описанным в разделе 6.2. Электроны – это возбуждения вблизи дна зоны с положительной эффективной массой. Вблизи потолка почти полностью заполненной энергетической зоны закон дисперсии для электронов характеризуется отрицательной эффективной массой, $\varepsilon = E_V - p^2/(2m^*)$. Дырки – свободные места вблизи потолка этой зоны. Их можно описывать как квазичастицы с *положительной* массой, но *отрицательным* зарядом.
2. *Фононы* – кванты нормальных колебаний решетки (различных бегущих волн). При трехмерном обобщении у них появляется дополнительная степень свободы – *поляризация*.
3. *Магноны* – кванты спиновых волн – колебаний магнитного момента атомов кристалла.
4. *Экситоны* в диэлектриках и полупроводниках – связанные состояния дырки и притягивающегося к ней электрона из вышележащей зоны (похожие на атом водорода).

6.6. Некоторые черты трёхмерной решетки

6.6.1. Идеальная решетка

■ Трансляционная симметрия

Идеальная периодичность решетки означает, что все пространство заполнено совершенно одинаковыми элементарными "кирпичиками". Такой "кирпичик", который, бесконечно повторяясь, заполняет все пространство без пропусков и наложений, называется *элементарной ячейкой*. Выбор ее неоднозначен уже в одномерном случае. В трехмерном случае к неоднозначности выбора "края" ячейки добавляется неоднозначность выбора основных направлений – *базисных кристаллографических осей*. Так, для кристалла $NaCl$ можно считать элементарной ячейкой куб Na с Cl в центре, или куб Cl с Na в центре, или наклонный параллелепипед Na , у которого одна сторона совпадает со стороной куба, другая направлена по диагонали грани куба, а Cl расположен на наклонной грани, и т.д.

Выбирая в каждой из заполнивших пространство примитивных ячеек одинаково расположенную опорную точку, мы получаем множество точек, связанных между собой *векторами трансляций*

$$\vec{T} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3, \quad (6.36)$$

где n_i — целые числа, а некопланарные векторы \vec{a}_i называют *векторами примитивных трансляций*. Параллелепипед, построенный на векторах \vec{a}_i , называют *примитивной ячейкой*. Ее объем $V_c = \vec{a}_1(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)$. Векторы примитивных трансляций обычно направляют из опорной точки, связанной с каким-нибудь ионом, в места расположения других ионов. Эти последние можно выбирать по-разному. Это соответствует линейным комбинациям первоначальных векторов \vec{a}_i , сохраняющим объем примитивной ячейки.

■ Точечная симметрия

Обычно кристаллическая решетка обладает точечной симметрией, т.е. переходит сама в себя под действием операций симметрии, оставляющих на месте одну из ее точек. Таким операциям соответствуют *элементы симметрии*:

- вращение на угол $2\pi/n$ — ось вращения n -го порядка;
- зеркальное отражение — плоскость отражения;
- инверсия — центр инверсии.

Сочетание различных элементов симметрии привносит дополнительные элементы. Например, если через ось вращения n -го порядка проходит плоскость отражения, то существует еще $n - 1$ такая плоскость. Полная совокупность операций точечной симметрии пространственного объекта образует группу — *точечную группу* преобразований объекта.

Жесткие ограничения возникают из требования совместимости операций точечной и трансляционной симметрии. В частности, по этой причине в кристаллах могут существовать оси вращения только 1-го (тривиальная), 2-го, 3-го, 4-го и 6-го порядков. (Требуется покрыть плоскость без перекрытий и пустот. Для этого необходимо, чтобы угол в вершине соответствующего правильного многоугольника был $2\pi/n$ с целым n .)

Полный набор операций точечной и трансляционной симметрии данного кристалла составляет его *пространственную группу*. Добросовестные кристаллографы перечислили все возможные пространственные группы кристаллов. Их оказалось 230, а более фундаментальных типов решеток (решеток Бравэ) всего 14.

Обсуждавшийся кристалл $NaCl$ обладает высокой – кубической – симметрией (гранцентрированная кубическая решетка). Подобная кубическая симметрия (простые, гранцентрированные, либо объемноцентрированные решетки) характерна и для подавляющего большинства металлов. А вот у наиболее используемых полупроводниковых кристаллов (Si, Ge, GaAs, InSb и т.д.) симметрия более хитрая: их кристаллическая решетка представляет собой две гранцентрированные кубические *подрешетки*, сдвинутые относительно друг друга вдоль главной диагонали куба на $1/4$ ее длины. Если обе подрешетки состоят из одинаковых ионов, такую структуру называют решеткой типа алмаза, а если из разных — решеткой типа цинковой обманки. Часто встречается и гексагональная симметрия, например, у графита и льда.

6.6.2. Обратная решетка.

Как мы видели, волна в кристалле характеризуется квазиимпульсом $\hbar\vec{q}$. Изменение величины квазиимпульса на величины типа $2\pi/a$ для линейной цепочки приводит к значению, которое физически не отличается от предыдущего. Таким образом, все пространство квазиимпульсов – *обратное пространство* – представляет собой подобие кристалла. Оно разбивается на эквивалентные друг другу ячейки – *элементарные ячейки обратной решетки*, подобные элементарной ячейке в обычном пространстве. Как и для обычного пространства, выбор элементарной ячейки обратной решетки неоднозначен.

Особую роль играют векторы обратной решетки, определяющие периодичность в пространстве квазиимпульсов и подобные векторам трансляций в обычном пространстве (6.36). Действительно, существенную часть задач физики твердого тела составляет описание распространения в кристаллических структурах различного рода волн — электромагнитных, квантовомеханических электронных, вибрационных,... Вообще говоря, период волны не согласуется с периодичностью кристаллической решетки. Однако, иногда волна и кристалл имеют одинаковую периодичность (ср. (6.36)). Это имеет место для таких волновых векторов \vec{G} , что для разных ионов решетки

$$e^{i\vec{G}(\vec{r}+\vec{T})} = e^{i\vec{G}\vec{r}}. \quad (6.37)$$

Соответствующие векторы \vec{G} называют векторами обратной решетки, причём $(\vec{G}\vec{T}) = 2\pi n$, где n целое. Набор векторов обратной решетки, образует узлы обратной решетки кристалла, подобные положениям

ионов прямой решетки. Легко сообразить, что прямая и обратная решетки обладают одинаковой симметрией.

Вектор \vec{G} можно разложить по векторам примитивной обратной решетки \vec{b}_i . Обычно эти векторы выбирают в соответствии с векторами примитивной решетки (6.36):

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{V_c}(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3); \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{V_c}(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1); \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{V_c}(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2). \quad (6.38)$$

При этом $\vec{G} = n_1\vec{b}_1 + n_2\vec{b}_2 + n_3\vec{b}_3$, где n_i – целые числа.

Среди возможных выборов примитивной элементарной ячейки в пространстве квазиимпульсов выделенную роль играет многогранник, который называют (первой) *зоной Бриллюэна* – трехмерное обобщение интервала $(-\pi/a, \pi/a)$ (6.2), рассматривавшегося для линейной цепочки. Он строится следующим образом:

- Выбранный узел обратной решетки (здесь помещают начало координат) соединяется векторами трансляций со всеми другими узлами решетки.
- Строятся плоскости, перпендикулярные этим векторам в их средних точках.
- Берется наименьший из получившихся многогранников, окружающих данную точку.

(Реально нет нужды тянуть векторы ко *всем* точкам обратной решетки, нескольких ближайших точек оказывается достаточно).

Можно показать, что в отличие от "стандартной" примитивной ячейки, зона Бриллюэна обладает точечной симметрией прямой решетки.

По смыслу определения (6.37), каждый из векторов обратной решетки перпендикулярен бесконечному набору равноотстоящих параллельных плоскостей, которые в совокупности содержат все точки прямой решетки. Поэтому координаты такого вектора в базисе (6.38) описывают и плоскости в реальном кристалле, соответствующие определенным "срезам" кристалла. Эти координаты называют *индексами Миллера*.

Перечислим теперь некоторые общие черты трехмерного закона дисперсии для электронов и фононов.

1. Поверхности равной энергии перпендикулярны плоскостям границ зоны Бриллюэна. Получающаяся форма такой поверхности может оказаться очень сложной. При приближении к границе зоны Бриллюэна перпендикулярная ей компонента групповой скорости электрона или фонона стремится к нулю.

2. Эффективная масса электрона и скорость звука могут быть анизотропными (и сильно анизотропными!). Соответственно, анизотропными будут проводимость, магнитная восприимчивость и другие физические свойства кристалла.
3. Дно энергетической зоны для электрона может лежать ниже потолка предыдущей зоны, находясь в другой области k -пространства. В этом случае говорят о перекрытии зон.

6.7. *Эффект Мёссбауэра

Пусть атомное ядро A массы M может находиться в возбужденном состоянии с энергией ϵ и переходить в основное состояние, излучая фотон с энергией ϵ' (γ – радиоактивность). (Для $A = Fe^{57}$ $\epsilon = 14 \text{ КэВ} = 1.4 \cdot 10^4 \text{ эВ}$, $Mc^2 \approx 53 \cdot 10^9 \text{ эВ}$, собственная ширина линии $\Gamma \approx 5 \cdot 10^{-9} \text{ эВ}$.)

Обсудим зависимость поглощения фотонов от их энергии в (не очень толстом) образце, содержащем ядра A . Пока энергия фотонов заметно отличается от ϵ , основным механизмом уменьшения их потока является рассеяние на атомах вещества (с возможной ионизацией последних). Не очень толстые образцы вещества почти прозрачны для таких γ квантов. Фотоны же с энергией ϵ должны сильно (резонансно) поглощаться в образце ядрами A , находившимися первоначально в невозбужденном состоянии., обеспечивая пик в коэффициенте поглощения.

Если теперь расположить близко друг к другу два образца, I и II, содержащих указанные ядра A , то на первый взгляд, фотоны, излучённые ядрами в образце I, будут сильно поглощаться в образце II из-за резонансного поглощения ядрами A этого образца. Однако, простое классическое рассмотрение заставляет ожидать другой картины, поскольку из-за отдачи вообще говоря энергия фотона $\epsilon' < \epsilon$.

◆ **Свободные ядра в газе.** Рассмотрим сначала покоящееся ядро. После излучения импульс отдачи ядра равен импульсу фотона $k = \epsilon'/c$, а энергия перехода ϵ есть сумма энергий фотона ϵ' и ядра $R = k^2/2M$:

$$\epsilon = \epsilon' + R; \quad R = k^2/2M = \epsilon'^2/(2Mc^2).$$

Поскольку обычно $\epsilon \ll Mc^2$, то с хорошей точностью $R = \epsilon'^2/(2Mc^2)$. Для Fe^{57} энергия отдачи $R \approx 2 \cdot 10^{-3} \text{ эВ} \gg \Gamma$. Такое изменение энергии γ – кванта можно получить за счет эффекта Доплера при скорости источника $v \approx 20 \text{ м/с}$.

Если ядро имело сначала импульс \vec{p} , то его начальная энергия $E_i = \mathbf{p}^2/2M$, а конечная $E_f = (\mathbf{p} - \mathbf{k})^2/2M$, энергия фотона - E_γ . Баланс

энергии: $E_i + \epsilon = E_f + E_\gamma$, т.е. $E_\gamma = \epsilon - R + \mathbf{k}\mathbf{p}/M = \epsilon - R + \mathbf{v}\mathbf{k}$.

Для газа это даёт распределение числа фотонов по энергиям E_γ , которое получается сверткой этого выражения для E_γ с известной функцией распределения, например распределения Максвелла. Это – кривая с максимумом вблизи $E_\gamma = \epsilon - R$ и с шириной этого максимума $\sim T$ (T – температура, измеряемая в энергетических единицах, т.е. мы пишем T вместо привычного kT). При $T \leq 10\text{K} \approx 10^{-3}\text{эВ}$ ширина максимума меньше R , т.е. вероятность найти $E_\gamma = \epsilon$ мала, и пик в коэффициенте поглощения должен был бы исчезнуть.

Эта классическая картина сохраняется и при квантовом подходе.

◆ Для ядер в кристалле только квантовое рассмотрение имеет смысл. Обозначим через $|i\rangle$ вектор начального состояния ядра А в кристалле (без учёта ядерных степеней свободы) – до излучения. После излучения фотона с импульсом k (которое происходит мгновенно с точки зрения атомных процессов) ядро переходит в состояние $\hat{T}_{-k}|i\rangle$, где $\hat{T}_{-k} = e^{i\vec{k}\vec{x}/\hbar}$ – оператор конечного сдвига в импульсном пространстве, в точности подобный оператору конечного сдвига в x – пространстве (1.24). В силу соотношения неопределённости, начальное состояние $|i\rangle$ не является состоянием с определённым значением импульса. Поэтому оно не ортогонально конечному состоянию $\hat{T}_{-k}|i\rangle$. Таким образом, имеется конечная вероятность того, что после излучения ядро не изменит своего квантового состояния, т.е. энергия излучённого фотона будет в точности ϵ . При этом возможность резонансного поглощения в образце II сохраняется.

В простейшей модели ядро находится в осцилляторном потенциале с частотой ω :

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2M} + \frac{M\omega^2 x^2}{2}.$$

Пусть $|i\rangle = |n\rangle$, т.е. $\hat{H}|i\rangle = \hbar\omega(n + 1/2)|i\rangle$. Тогда $|f\rangle = \hat{T}_{-k}|i\rangle$. Возможные значения энергии фотона $E_\gamma = \epsilon - \hbar\omega(n' - n)$ образуют дискретный набор. Вероятность перехода $|n\rangle \rightarrow |n'\rangle$ есть $P_{nn'} = |\langle n'|\hat{T}_{-k}|n\rangle|^2$. В частности, может быть, что ядро останется в том же состоянии, т.е. что отдачи нет и $E_\gamma = \epsilon$:

$$P_{nn} = \left| \langle n|\hat{T}_{-k}|n\rangle \right|^2 = \left| \int dx |\psi_n(x)|^2 e^{ikx/\hbar} \right|^2 = \left| \int \rho_n(x) e^{ikx/\hbar} dx \right|^2 \equiv |F_n(k)|^2.$$

Введённая здесь величина $F_n(k)$ – фурье-образ плотности вероятности; ее называют **формфактором**. Если $\rho_n(x) = \rho_n(-x)$, то $F_n(k)$ – действительна. При малых k

$$F_n(k) = \int \rho_n(x) \cdot (1 + ikx/\hbar - (1/2)(kx/\hbar)^2 + \dots) dx \approx 1 - (1/2)(k/\hbar)^2 \langle x^2 \rangle$$

Если начальное состояние – основное, $n = 0$, то $|f\rangle$ – когерентное состояние (см. раздел 4.2) с $\alpha = -i\hbar k/\sqrt{2m\hbar\omega}$. Вероятность излучения без отдачи дается соотношением (4.25):

$$P_{00} = e^{-k^2/2m\hbar\omega^2} \equiv e^{-R/\hbar\omega}.$$

Для реального кристалла смещение ядра следует разложить по нормальным колебаниям решетки, плотность числа которых есть $\rho(\omega)$ (13.23). В итоге получается

$$P_{00} = \exp\left(-\int \frac{R}{\hbar\omega} \rho(\omega) d\omega\right). \quad (6.39)$$

Правая часть этого соотношения называется *фактором Дебая – Валлера*. Он встречается и в других задачах физики твердого тела. Его изучение – хороший способ исследования свойств решетки в целом.

6.8. Задачи

1. Докажите утверждения (6.12), (6.16).
2. Решите задачу о периодическом потенциале (6.13) для $G \rightarrow -G$ ("забор вверх"). Покажите, что в этом случае справедливо второе из соотношений (6.15).
3. Покажите, что для периодического потенциала (6.13) при $k_0 a \gg 1$ возникает узкая разрешённая зона в границах $-\hbar^2 k_0^2/8m (1 \pm 4e^{-k_0 a/2})/2$ (сравните с расщеплением в паре ям).
4. При $k_0 a \gg 1$ решить уравнение (6.15) и найти в явном виде зависимость $E(q)$. Найти отсюда m^* . Найти ток j_x и показать, что одному значению E при разных q соответствуют разные j_x . Сравнить с поведением классической частицы в таком поле.
5. Найти эффективную массу электрона для нижней зоны в поле (6.13) при $k_0 a \ll 1$.

Ответ: $m^* = m e^{k_0 a}/2(k_0 a)^2$.

Как меняется эффективная масса при переходе к более высоко лежащим зонам?

6. В соответствии с определением (6.3), блоховская амплитуда, отвечающая решению для периодического потенциала (6.13), есть $u_q(x) = A[e^{-iqx}\text{sh}\kappa(a-x) + e^{iq(a-x)}\text{sh}\kappa x]$. Найдите коэффициент A (из условия нормировки на ячейке (6.3)).
7. Найти энергию и волновую функцию "связанного состояния", локализованного вблизи "примеси в поле (6.13) при $x = a$ сделана замена: $-G\delta(x-a) \rightarrow -G_1\delta(x-a)$.
Ответ: $E = -mG_1^2/2\hbar^2$.
8. Найти энергию поверхностного (Таммовского) уровня для задачи на полупрямой при $k_0a \gg 1$ ($0 < b < a$):

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } 0 < x < b, \\ -G \sum_{n=1}^{\infty} \delta(x-na) & \text{при } x > b. \end{cases}$$

Ответ: $E_T = -\frac{\hbar^2 k_0^2}{2m} (1 - 2e^{-2k_0 b})$.

9. Найти поток энергии волнового пакета атомных смещений, распространяющегося по простой линейной цепочке.
10. Построить собственные состояния для линейной цепочки с закреплёнными концами.

Глава 7

МОМЕНТ ИМПУЛЬСА

Оператор момента импульса (в англоязычной литературе – angular momentum – угловой момент) частицы задается, как и в классическом случае, соотношением (1.9)

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} \equiv \hbar \cdot \hat{\boldsymbol{\ell}}. \quad (7.1)$$

Мы определили здесь еще безразмерный оператор $\hat{\boldsymbol{\ell}} \equiv \hat{\mathbf{L}}/\hbar$, удобный при вычислениях, его мы тоже называем оператором момента импульса.

7.1. Следствия алгебры коммутаторов

Ряд свойств момента импульса определяется только его перестановочными соотношениями. Они не зависят от реализации операторов как функций координат. Эти свойства сохраняются и в отсутствие такой реализации – для операторов суммарного момента системы частиц, для спина (см. ниже), ...

• Решая задачу 1.9, мы установили, что имеют место перестановочные соотношения (1.33)

$$[\hat{\ell}_i, \hat{\ell}_j] = ie_{ijk}\hat{\ell}_k. \quad (7.2)$$

Более того, подобные соотношения существуют для любой векторной величины $\hat{\mathbf{A}}$ (мы проверили это для случаев $\hat{\mathbf{A}} = \vec{r}$ и \vec{p}):

$$[\hat{\ell}_i, \hat{A}_j] = ie_{ijk}\hat{A}_k. \quad (7.3)$$

Эти соотношения описывают преобразования компонент векторов при бесконечно малых вращениях вокруг осей z , x и y соответственно. Поэтому говорят, что $\hat{\ell}_i$ (\hat{L}_i) – генераторы группы вращений. В частности, $\hat{\ell}_3 \equiv \hat{\ell}_z$ – генератор вращения вокруг оси z .

• Соотношения (7.2) показывают, что различные компоненты момента импульса не могут быть фиксированны одновременно (не измеримы одновременно); имеют место соотношения неопределённости вида

$$\Delta \ell_x \cdot \Delta \ell_y \geq \frac{|\langle \ell_z \rangle|}{2}. \quad (7.4)$$

Это означает, что не существует такого состояния квантовой системы, в которой трёхмерный вектор момента импульса был бы сохраняющейся величиной с ненулевыми значениями всех проекций. Так, для тонкого диска, который вращается вокруг оси z в классической механике вектор углового момента направлен строго по этой оси. В квантовой механике направление момента импульса лишь в среднем совпадает с направлением оси z . Существуют конечные вероятности найти диск и в состояниях с определёнными значениями проекций момента импульса на оси x и y .

• В то же время из (7.2) следует, что

$$[\hat{\ell}^2, \hat{\ell}_i] = 0 \quad \left(\hat{\ell}^2 \equiv \hat{\ell}_x^2 + \hat{\ell}_y^2 + \hat{\ell}_z^2 \right), \quad (7.5)$$

т.е. квадрат момента и его проекция на одну из осей (например $\hat{\ell}_z$) одновременно измеримы. Мы будем искать совместные собственные векторы этих операторов, обозначив их временно как $|\lambda, m\rangle$:

$$|\lambda, m\rangle \Rightarrow \hat{\ell}^2 |\lambda, m\rangle = \lambda |\lambda, m\rangle; \quad \hat{\ell}_z |\lambda, m\rangle = m |\lambda, m\rangle.$$

Можно показать, что из компонент оператора момента импульса нельзя построить ещё один нетривиальный оператор, коммутирующий с $\hat{\ell}^2$ и $\hat{\ell}_z$, но не выражающийся через них¹. Поэтому вектор $|\lambda, m\rangle$ содержит полную информацию о состоянии системы.

□ Определим еще

$$\hat{\ell}_{\pm} = \hat{\ell}_x \pm i\hat{\ell}_y. \quad (7.6)$$

Тогда из соотношений (7.2) получается

$$[\hat{\ell}_+, \hat{\ell}_-] = 2\hat{\ell}_z; \quad [\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_{\pm}] = \pm\hat{\ell}_{\pm}; \quad (7.7)$$

$$\hat{\ell}^2 = \hat{\ell}_+ \hat{\ell}_- + \hat{\ell}_z^2 - \hat{\ell}_z = \hat{\ell}_- \hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_z^2 + \hat{\ell}_z. \quad (7.8)$$

Далее мы действуем таким же способом, как и при решении задачи об осцилляторе. Существенное различие состоит в том, что для осциллятора возможные собственные значения оператора $\hat{a}^+ \hat{a}$ не ограничены

¹ Это – свойство группы трёхмерных вращений $O(3)$.

сверху, в то время как для оператора $\hat{\ell}_+\hat{\ell}_-$ возможные собственные значения ограничены сверху величиной λ .

□ Рассмотрим векторы $\hat{\ell}_\pm|\lambda, m\rangle$. Поскольку $[\hat{\ell}^2, \hat{\ell}_\pm] = 0$, то

$$\hat{\ell}^2\hat{\ell}_\pm|\lambda, m\rangle = \hat{\ell}_\pm\hat{\ell}^2|\lambda, m\rangle = \lambda\hat{\ell}_\pm|\lambda, m\rangle,$$

т.е. $\hat{\ell}_\pm|\lambda, m\rangle$ - собственные векторы оператора $\hat{\ell}^2$ с тем же собственным значением λ , что и у $|\lambda, m\rangle$. С другой стороны, из соотношения $[\hat{\ell}_z, \hat{\ell}_\pm] = \pm\hat{\ell}_\pm$ следует, что $\hat{\ell}_z\hat{\ell}_\pm|\lambda, m\rangle = \hat{\ell}_\pm\hat{\ell}_z|\lambda, m\rangle \pm \hat{\ell}_\pm|\lambda, m\rangle = (m \pm 1)\hat{\ell}_\pm|\lambda, m\rangle$. Это означает, что $\hat{\ell}_\pm|\lambda, m\rangle$ - собственные векторы оператора $\hat{\ell}_z$ с собственными значениями $m \pm 1$:

$$\hat{\ell}_\pm|\lambda, m\rangle = c_{\lambda m}^\pm|\lambda, m \pm 1\rangle. \quad (7.9)$$

Поэтому $\hat{\ell}_+$ ($\hat{\ell}_-$) — *повышающий* (*понижающий*) операторы.

□ Поскольку операторы $\hat{\ell}_i$ эрмитовы, то средние значения операторов $\hat{\ell}_x^2$ и $\hat{\ell}_y^2$ не отрицательны (ср. решение задачи (15)). Следовательно, среднее $\langle|\hat{\ell}_z^2|\rangle$ по любому состоянию не превышает $\lambda = \langle|\hat{\ell}^2|\rangle$. Поэтому при заданном λ существует наибольшее значение m , обозначим его ℓ . Как и в случае с действием оператора уничтожения на основное состояние осциллятора, из определения ℓ следует, что $\hat{\ell}_+|\lambda, \ell\rangle = 0$. Из (7.8) следует, что $(\hat{\ell}^2 - \hat{\ell}_z^2 - \hat{\ell}_z)|\lambda, \ell\rangle = \hat{\ell}_-\hat{\ell}_+|\lambda, \ell\rangle = 0$, т.е. получается

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

Теперь мы перейдем к обычно используемым обозначениям – заменим символ λ в $|\lambda, m\rangle$ на ℓ , т.е. будем писать $|\ell, m\rangle$ взамен $|\lambda, m\rangle$:

$$\hat{\ell}^2|\ell, m\rangle = \ell(\ell + 1)|\ell, m\rangle; \quad \hat{\ell}_z|\ell, m\rangle = m|\ell, m\rangle. \quad (7.10)$$

В силу (7.9), $(\hat{\ell}_-)^k|\ell, \ell\rangle \propto |\ell, \ell - k\rangle$. Увеличивая k , мы придем к наименьшему собственному значению $\hat{\ell}_z$, равному $-\ell$. Поэтому

$$\boxed{2\ell - \text{целое число.}} \quad (7.11)$$

Полное же число состояний с различными ℓ_z при фиксированном значении ℓ есть, очевидно, $2\ell + 1$.

Соотношение (7.10) означает, что даже в состоянии с наибольшим значением проекции момента на ось z , при $m = \ell$ квадрат длины вектора момента больше ℓ_z^2 , т.е. $\ell_x^2, \ell_y^2 \neq 0$. Этот факт нетрудно понять с помощью соотношения неопределенностей (7.4). В состоянии $|\ell, m\rangle$ средние значения проекций момента на оси x и y — нули, т.е., например, $\ell_x^2 = \Delta\ell_x^2$. Из симметрии задачи ясно, что $\Delta\ell_x = \Delta\ell_y$. Поэтому равенство

$\langle \ell_x^2 \rangle + \langle \ell_y^2 \rangle + \langle \ell_z^2 \rangle = \ell(\ell + 1)$ для состояния $|\ell, \ell\rangle$ означает, что $\langle \ell_x^2 \rangle = \ell/2$, и произведение $\Delta \ell_x \Delta \ell_y$ тоже равно $\ell/2$ — в соответствии с выписанным соотношением неопределенностей. Иными словами, в состоянии $|\ell, \ell\rangle$ реализуется минимально допустимый соотношением неопределенностей разброс проекций момента на оси x и y .

• **Матричные элементы ℓ_{\pm} .**

Усреднение (7.8) по состояниям $|\ell, m\rangle$ с учётом соотношения (7.9) даёт цепочку равенств:

$$\begin{aligned} \langle \ell, m | \hat{\ell}^2 | \ell, m \rangle &\equiv \ell(\ell + 1) = \\ \langle \ell, m | \hat{\ell}_- \hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_z^2 + \hat{\ell}_z | \ell, m \rangle &\langle m | \hat{\ell}_- \hat{\ell}_+ | m \rangle + m + m^2 = \\ \langle m | \hat{\ell}_- | m + 1 \rangle \langle m + 1 | \hat{\ell}_+ | m \rangle + m^2 + m &\Rightarrow \\ |\langle m + 1 | \hat{\ell}_+ | m \rangle|^2 &= \ell^2 + \ell - m^2 - m. \end{aligned}$$

Если ещё потребовать, чтобы матричные элементы были положительными числами, то отсюда получается

$$\langle m + 1 | \hat{\ell}_+ | m \rangle = \sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)}. \quad (7.12)$$

Теперь матричные элементы $\hat{\ell}_x$ и $\hat{\ell}_y$ определяются так же, как матричные элементы операторов \hat{x} и \hat{p} для осциллятора:

$$\hat{\ell}_x = \frac{\hat{\ell}_+ + \hat{\ell}_-}{2}, \quad \hat{\ell}_y = \frac{\hat{\ell}_+ - \hat{\ell}_-}{2i}.$$

◇ Полученные выражения дают возможность записать матрицы операторов ℓ_i в ℓ_z -представлении — подобно представлениям операторов координат и импульса для осциллятора (4.15). Запишем эти матрицы для $\ell = 1$, имея в виду строки и столбцы, отвечающие $\ell_z = 1, 0, -1$:

$$\ell_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \ell_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \ell_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7.13)$$

• **Чётность собственных состояний момента.**

При отражении координат компоненты радиуса-вектора и импульса меняют знак, $\mathcal{P}\mathbf{r} = -\mathbf{r}$, $\mathcal{P}\mathbf{p} = -\mathbf{p}$. Такие векторы называют *полярными* (или просто векторами). Полярным вектором является, например, и вектор электрического поля E .

В то же время, согласно определению (7.1), компоненты вектора момента импульса при отражении не меняют знак,

$$\mathcal{P}L_i = L_i, \quad \text{или} \quad [\mathcal{P}, L_i] = 0. \quad (7.14)$$

Поэтому существуют общие собственные состояния оператора пространственного отражения $\hat{\mathcal{P}}$ и операторов $\hat{\ell}^2$ и $\hat{\ell}_z$. Именно они были найдены выше. Иными словами, **состояния $|\ell, m\rangle$ имеют определённую чётность; состояния $|\ell, m\rangle$, различающиеся лишь проекцией m момента на ось z , имеют одинаковую чётность.**

Векторы, координаты которых не меняются при отражении, называют *аксиальными* (или псевдовекторами). Помимо момента импульса, аксиальным вектором является также и вектор магнитного поля B .

В гамильтониан (скаляр в трёхмерном галилеевом мире) могут входить скалярные произведения двух полярных векторов, например, (\mathbf{pA}) или двух аксиальных векторов, например, (\mathbf{LB}) , но не может входить скалярное произведение полярного и аксиального векторов (это – *псевдоскаляр*, который меняет знак при отражении).

7.2. Следствия координатной записи

Переход к сферическим координатам $z = r \cos \theta$, $x = r \sin \theta \cos \phi$, $y = r \sin \theta \sin \phi$ совершается по стандартным правилам дифференцирования. В частности, например, обозначая $\rho^2 = x^2 + y^2$, имеем

$$\frac{\hat{p}_y}{-i\hbar} \equiv \frac{\partial}{\partial y} = \frac{y}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{yz}{r^2 \rho} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{x}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \phi}.$$

После простых преобразований получается

$$\begin{aligned} \hat{\ell}_z &= -i \frac{\partial}{\partial \phi}; & \hat{\ell}_{\pm} &= e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right); \\ \hat{\ell}^2 &= - \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \end{aligned} \quad (7.15)$$

◆ Найдём собственные функции оператора момента $\langle \theta, \phi | \ell, m \rangle$.

◇ Собственные функции оператора $\hat{\ell}_z$, $\varphi_m(\phi)$ это – решения уравнения $\hat{\ell}_z \varphi_m \equiv -i \cdot \partial \varphi_m / \partial \phi = m \varphi_m$. Они имеют вид: $\varphi_m(\phi) = (2\pi)^{-1/2} \cdot e^{im\phi}$. Требование однозначности этих функций при вращении на угол 2π имеет вид $\varphi_m(\phi + 2\pi) = \varphi_m(\phi)$. Отсюда следует, что реализуются только целочисленные собственные значения m :

$$\varphi_m(\phi) = \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \Rightarrow \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (7.16)$$

Эти соотношения – частный случай (7.11).

◇ В итоге сферические гармоники можно представить в факторизованном виде $Y_{\ell m} = P_{\ell m}(\theta) \cdot \varphi_m(\phi)$. Перейдём к определению зависимости от полярного угла θ , т.е. функций $P_{\ell m}(\theta)$. Подобно тому как это делалось для осциллятора, начнём с наибольшего значения проекции момента $m = \ell$. Чтобы найти $P_{\ell, \ell}(\theta)$, используем уравнение $\hat{\ell}_+ \psi_{\ell \ell} = 0$:

$$e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cdot \text{ctg} \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) e^{i\ell \phi} P_{\ell \ell}(\theta) = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial \theta} P_{\ell \ell} = \ell \cdot \text{ctg} \theta P_{\ell \ell}.$$

Отсюда получается: $P_{\ell \ell} \propto \sin^\ell \theta$. Их нормируют обычно следующим образом:

$$Y_{\ell \ell}(\theta, \phi) = P_{\ell \ell}(\theta) \varphi_{\ell \ell}(\phi) = (-i)^\ell \sqrt{\frac{(2\ell + 1)!}{4\pi}} \frac{1}{2^\ell \cdot \ell!} \cdot \sin^\ell \theta \cdot e^{i\ell \phi}. \quad (7.17a)$$

Остальные функции получаются из $Y_{\ell \ell}$ действием оператора $(\hat{\ell}_-)^k$: $\psi_{\ell, \ell-k} \propto (\hat{\ell}_-)^k Y_{\ell, \ell}$. Они выражаются через присоединённые функции Лежандра $P_{\ell m}(\cos \theta)$. Нормированные функции $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ называют *сферическими функциями* (*сферическими гармониками*):

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = (i)^{\ell+m+|m|} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \cdot \frac{(\ell + |m|)!}{(\ell - |m|)!}} \cdot P_{\ell m}(\cos \theta) e^{im\phi}. \quad (7.17b)$$

Заметим, что функции, отвечающие противоположным проекциям момента, связаны соотношением

$$Y_{\ell, -m} = (-1)^{\ell-m} Y_{\ell, m}^*. \quad (7.17c)$$

▽ *Примеры.* Обозначим через n_i компоненты вектора \vec{r}/r , $n_x = \sin \theta \cos \phi$, $n_y = \sin \theta \sin \phi$, $(n_\pm = n_x \pm i n_y)$, $n_z = \cos \theta$. Тогда

$$\begin{aligned} Y_{00} &= 1/\sqrt{4\pi}; \\ Y_{10} &= i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot \cos \theta = i\sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot n_z, \\ \bar{Y}_{1, \pm 1} &= \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \cdot \sin \theta e^{\pm i\phi} = \mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}} n_\pm, \\ Y_{\ell, \ell} &\propto n_+^\ell, \quad Y_{\ell, \ell-1} \propto n_+^{\ell-1} n_z. \end{aligned} \quad (7.18)$$

Это означает, что компоненты вектора \vec{r}/r можно отождествить со сферическими функциям Y_{1m} и наоборот.

• **Отражение** координат $\mathcal{P}\vec{r} = -\vec{r}$ в сферических координатах означает $r \rightarrow r$, $\theta \rightarrow \pi - \theta$, $\phi \rightarrow \phi + \pi$. Нетрудно проверить, что собственная функция состояния $|\ell, \ell\rangle = Y_{\ell, \ell}$ при таком преобразовании умножается на $(-1)^\ell$. А поскольку операторы ℓ_\pm сохраняют чётность, то и для любых значений m имеем $Y_{\ell m}(-\vec{r}) = (-1)^\ell Y_{\ell m}(\vec{r})$. Это означает, что чётность состояния с определённым значением орбитального момента ℓ есть $(-1)^\ell$,

$$\mathcal{P}|\ell, m\rangle = (-1)^\ell |\ell, m\rangle. \quad (7.19)$$

Подчеркнем, что это соотношение, как и выражение (7.16), справедливо только в случае, когда оператор момента импульса связан с координатами соотношениями (7.15). Эта связь исчезает, и указанные свойства могут не иметь места, например, для суммарного момента нескольких электронов (электроны одного атома или иона). В частности, при этом собственные функции момента импульса продолжают оставаться собственными функциями оператора пространственного отражения, т.е. имеют определённую чётность, а соотношения (7.19) нет.

7.3. Задачи

1. На первый взгляд, в соответствии с нашими правилами построения операторов по классическим величинам, нам нужно симметризовать оператор момента импульса (7.1) $\hat{L} \rightarrow (\hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{r}})/2$. *Покажите*, что в данном случае такая операция не даёт ничего нового.
2. Получить выражения (7.15).
3. Найти средние значения операторов L_x^2 и L_y^2 в состоянии $|\ell, m\rangle$. Можно ли одновременно измерить эти величины?
4. Найти средние значения операторов $\langle \ell_x \rangle$, $\langle \ell_y \rangle$, $\langle \ell_z \rangle$, $\langle \ell_x \ell_y \rangle$, $\langle \ell_z \ell_x \rangle$, $\langle \ell_x^2 \rangle$, $\langle \ell_y^2 \rangle$, $\langle \ell_z^2 \rangle$ в состояниях $\bullet |\ell, \ell\rangle$, $|\ell, m\rangle$, $\bullet (|1, 1\rangle + |1, -1\rangle)/\sqrt{2}$, $\bullet (|1, 1\rangle + |1, 0\rangle)/\sqrt{2}$. Куда направлен вектор ℓ в этих состояниях?
5. При каких m, m' будет $\langle m|x_i|m'\rangle \neq 0$; $\langle m|x_i x_j|m'\rangle \neq 0$? (Использовать соотношения (7.2).)
6. В состояниях $\psi(\phi, 0) = I)A \cdot \cos^2 \phi$, $II)C \cdot e^{i\phi} \cdot \cos^2 \phi$, $III)B \cdot (1 + \cos \phi)$ найти $\langle \ell_z \rangle$ и вероятности различных значений проекции момента на ось z . Как меняются со временем средние значения $\langle \ell_z \rangle$ в случае плоского ротатора $\hat{H} = \hat{L}_z^2/2I$?
7. Пусть m — проекция момента на ось z , а ось z' повернута под углом

α к оси z . В состоянии $|\ell, m\rangle$ найти вероятности разных значений $\ell_{z'}$ и средние $\langle \hat{\ell}_{z'} \rangle$, $\langle \hat{\ell}_{z'}^2 \rangle$.

8. Пусть операторы \hat{b} и \hat{b}^+ имеют перестановочные соотношения (4.5) (такие же, как для гармонического осциллятора). Покажите, что операторы $\hat{\ell}_- = \sqrt{2\ell - \hat{b}^+ \hat{b}} \cdot \hat{b}$, $\hat{\ell}_+ = \hat{b}^+ \sqrt{2\ell - \hat{b}^+ \hat{b}}$ обладают теми же перестановочными соотношениями, что и операторы компонент момента импульса (7.6). Найти соответствующий оператор $\hat{\ell}_z$.

Глава 8

ЦЕНТРАЛЬНО–СИММЕТРИЧНОЕ ПОЛЕ

8.1. Задача двух тел. Общие свойства

Задача двух тел, взаимодействие которых зависит только от расстояния между ними, описывается гамильтонианом:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|).$$

Для описания движения пары частиц удобно ввести координаты и импульс центра масс \hat{R} и \hat{P} и относительного движения \hat{r} и \hat{p} (и соответствующие массы M и m),

$$\begin{aligned} \hat{R} &= \left(\frac{m_2 \hat{r}_1 + m_1 \hat{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \hat{P} = \hat{p}_1 + \hat{p}_2, \quad M = m_1 + m_2, \\ \hat{r} &= \hat{r}_1 - \hat{r}_2, \quad \hat{p} = \frac{m_2 \hat{p}_1 - m_1 \hat{p}_2}{m_1 + m_2}, \quad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}. \end{aligned} \quad (8.1a)$$

Перестановочные соотношения между операторами координат и импульса каждого из этих движений таковы же, как и для отдельной частицы (1.20),

$$[\hat{P}_i, \hat{R}_j] = -i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{p}_i, \hat{r}_j] = -i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{p}_i, \hat{R}_j] = [\hat{P}_i, \hat{r}_j] = 0. \quad (8.1b)$$

Движения двух тел по отдельности входят только в выражение для кинетической энергии. В свою очередь, операторы импульсов разных частиц коммутируют друг с другом. Поэтому – в точности, как в классической механике – эта кинетическая энергия, а вслед за ней и гамильтониан разбивается на сумму гамильтониана движения центра масс $\hat{P}^2/2M$ и гамильтониана относительного движения.

◇ Движение центра масс (атома в целом) – свободное, оно описывается обычными плоскими волнами.

◇ Относительное движение описывается как движение частицы с приведенной массой m в поле центра, расположенного в начале координат, $U(r)$. Нетрудно проверить, что коммутаторы операторов $\hat{\mathbf{p}}$ и $\hat{\mathbf{r}} = \hat{\mathbf{r}}_1 - \hat{\mathbf{r}}_2$ для относительного движения таковы же, как и для движения одной частицы. Именно поэтому можно рассматривать относительное движение как движение частицы в поле силы, зависящей только от расстояния до центра. Это и делается ниже.

• Если $U(r)$ не зависит от направления, то гамильтониан коммутирует с компонентами оператора момента импульса, например, $[\hat{\ell}_x, \hat{H}] = 0$, $[\hat{\ell}_y, \hat{H}] = 0$. Поэтому в силу теоремы (2.11) стационарные состояния выроднены. В силу той же коммутативности, существуют общие собственные функции гамильтониана и операторов $\hat{\ell}^2$ и $\hat{\ell}_z$. Это означает, что при отыскании таких функций должен работать метод разделения переменных. Для детального описания здесь удобны сферические координаты, в них уравнение Шредингера имеет вид:

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

Здесь $\Delta_{\theta, \phi}$ – угловая часть оператора Лапласа¹. Она совпадает с оператором $-\hat{\ell}^2$ (7.15).

Разделяя переменные, т.е. записав $\psi = R(r)Z(\theta, \phi)$, мы можем использовать для угловой части Z найденные выше решения задачи на собственные значения $\hat{\ell}^2 Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \ell(\ell + 1)Y_{\ell m}(\theta, \phi)$. В итоге волновая функция принимает вид:

$$\psi = R_{\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta, \phi), \quad (8.2)$$

и для радиальной функции получается уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) R_{E\ell} + U_{eff} R_{E\ell} = E_{\ell} R_{E\ell}, \quad (8.3a)$$

$$U_{eff} = U(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2mr^2}.$$

¹ В классическом случае первый член отвечает квадрату оператора радиального импульса \hat{p}_r^2 . Однако, в криволинейных (сферических) координатах этот оператор уже не связан с радиусом-вектором r соотношением $\hat{p}_r = -i\hbar(\partial/\partial r)$. Именно поэтому радиальная часть лапласиана не является квадратом какого-нибудь "естественного" оператора.

Вопреки ожиданиям, это уравнение не выглядит похожим на одномерное уравнение Шредингера, но оно преобразуется в обычное одномерное уравнение Шредингера на полупрямой с зависящим от ℓ потенциалом $U_{eff}(r)$, заменив $U(r)$ для функции $\chi_{E\ell} = rR_{E\ell}$,

$$-\frac{d^2\chi_{E\ell}}{dr^2} + \frac{2mU_{eff}(r)}{\hbar^2}\chi_{E\ell} = k^2\chi_{E\ell} \quad \left(k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad \chi_{E\ell} = rR_{E\ell} \right). \quad (8.3b)$$

и с обычным условием нормировки в дискретном спектре

$$\int_0^\infty |R_{E\ell}|^2 r^2 dr = \int_0^\infty |\chi_{E\ell}^2| dr = 1. \quad (8.3c)$$

Конечность $R_{E\ell}(r)$ в нуле выглядит как граничное условие

$$\chi_{E\ell}(r = 0) = 0. \quad (8.3d)$$

Ниже мы нередко будем использовать значок k вместо E в обозначении радиальных функций.

- В одномерном случае в поле притяжения при $U(x \rightarrow \pm\infty) = 0$ всегда существовал хотя бы один дискретный уровень энергии. В трёхмерном случае это не так. Граничное условие (8.3d) "выталкивает" уровень. В общем случае потенциала, сосредоточенного в области размера a , где его характерное значение составляет \bar{V} ,

$$\text{дискретные уровни не существуют, если } |\bar{V}| < \hbar^2/(2ma^2). \quad (8.4)$$

Иными словами, дискретный уровень может существовать только если абсолютное значение средней характерной потенциальной энергии в области локализации потенциала больше кинетической энергии, необходимой для локализации внутри этого объёма.

- ◆ Собственные значения энергии нумеруются, начиная с наименьшего. Поэтому – по определению – с ростом n_r при фиксированном ℓ энергия состояния возрастает.

- ◆ Используем правило дифференцирования энергии по параметру:

$$\frac{\partial E_{n_r\ell}}{\partial \ell} = \langle n_r, \ell | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \ell} | n_r, \ell \rangle = \langle n_r, \ell | \frac{\hbar^2(2\ell + 1)}{2mr^2} | n_r, \ell \rangle \geq 0. \quad (8.5)$$

Это означает, что в центрально-симметричном поле с ростом ℓ при фиксированном n_r энергия возрастает.

▼ *Поведение при $r \rightarrow 0$.* Пусть $r^2 U(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow 0$. Тогда при малых r в радиальном уравнении (8.3b) остаётся только центробежный член, и оно принимает вид $\chi_{k\ell}'' = \ell(\ell + 1)\chi_{k\ell}/r^2$. Его решение можно искать в виде $\chi_\ell = r^a$, и уравнение принимает вид $a(a - 1) = \ell(\ell + 1)$, т.е. его решения имеют вид $R_{k\ell} = \chi_{E\ell}/r \sim r^\ell$ и $R_{k\ell} = \chi_{E\ell}/r \sim r^{-\ell-1}$. В итоге

$$R_{E\ell} \rightarrow r^\ell \text{ или } \rightarrow r^{-(\ell+1)} \text{ при } r \rightarrow 0. \quad (8.6)$$

Второе решение не удовлетворяет граничному условию, обычно оно отбрасывается. Отметим, что $\psi(0) \neq 0$ лишь для $\ell = 0$.

▼ *Поведение при $r \rightarrow \infty$.* Если поле убывает с расстоянием достаточно быстро, то при $r \rightarrow \infty$ можно пренебречь эффективным потенциалом, и уравнение Шредингера (8.3b) принимает вид $\chi_{k\ell}'' = -k^2\chi_{k\ell}$. Поэтому

$$\begin{aligned} R_{E\ell} &\sim \frac{\sin(kr + \alpha)}{r} & \text{при } E > 0 & \quad \left(k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \right), \\ R_{E\ell} &\sim \frac{e^{-\varkappa r}}{r} & \text{при } E < 0 & \quad \left(\varkappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \right). \end{aligned} \quad (8.7)$$

• *Терминология.* Величину ℓ называют *орбитальным* квантовым числом, а m – *магнитным*. Значения $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots$ обозначают буквами s, p, d, f, \dots , соответственно. (Эти обозначения сложились из названий спектральных линий атома водорода – sharp, principal, diffusive, fundamental, а дальше просто по алфавиту.) *Радиальным квантовым числом* называют число нулей n_r функции $R_\ell(r)$. *Главным квантовым числом* называют число $n = n_r + \ell + 1$.

∇ В дальнейшем мы будем обозначать состояния атомных систем значком $|N\rangle$, понимая под N набор квантовых чисел n_r, ℓ, m и другие возможные квантовые числа, появляющиеся при описании более сложных систем.

8.2. Поле, быстро убывающее с расстоянием

В большинстве физически интересных случаев взаимодействие быстро убывает с расстоянием так, что начиная с некоторого расстояния R_0 движение можно считать свободным. Если к тому же $kR_0 \ll 1$, то при $r > R_0$ реализуются обе рассмотренные выше асимптотические возможности, а требование обращения $\chi_\ell(r)$ в нуль при $r \rightarrow 0$ для решения в этой области перестаёт быть обязательным. Мы и разберём сейчас такое "свободное" движение.

При $\ell = 0$ уравнение Шредингера имеет вид $\chi'' + k^2\chi = 0$. Выберем два независимых решения этого уравнения:

$$R_{k0}^s(r) \equiv \frac{\chi_k^s(r)}{r} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(kr)}{r}; \quad R_{k0}^c(r) \equiv \frac{\chi_k^c(r)}{r} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\cos(kr)}{r}. \quad (8.8)$$

Эти решения нормированы на δ -функцию "по шкале k ":

$$\int \chi_k \cdot \chi_p dr = \delta(k - p).$$

Для случая $\ell \neq 0$ выделим из $R_{k\ell}$ множитель r^ℓ (поведение при малых r) $R_{k\ell} = r^\ell \phi_\ell(r)$. Тогда уравнение Шредингера (8.3b) примет вид

$$\phi_\ell'' + 2(\ell + 1) \frac{\phi_\ell'}{r} + k^2 \phi_\ell = 0.$$

Продифференцируем это уравнение по r и подставим $f(r) = \phi_\ell'/r$. Получившееся уравнение совпадает с уравнением для $\phi_{\ell+1}$. Это означает, что $\phi_{\ell+1} \propto f(r) = \frac{1}{r} \frac{d\phi_\ell}{dr}$. Решая это рекуррентное соотношение, найдем (ниже еще восстановлена нормировка)

$$R_{k\ell}^s(r) = \left(\frac{r}{k}\right)^\ell \left(-\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(kr)}{r}\right) \equiv \sqrt{\frac{k}{r}} J_{\ell+1/2}(kr); \quad (8.9)$$

$$R_{k\ell}^c(r) = \left(\frac{r}{k}\right)^\ell \left(-\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \left(\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\cos(kr)}{r}\right) \equiv \sqrt{\frac{k}{r}} N_{\ell+1/2}(kr).$$

Здесь $J_\alpha(x)$ и $N_\alpha(x)$ — функции Бесселя и Неймана соответственно. (Для полностью свободного движения $\chi(0) = 0$, остается только решение R^s .)

Проверим, что асимптотики этих решений совпадает с (8.6) и (8.7).

• При $kr \ll 1$ $\sin(kr)/r$ раскладывается в ряд по степеням r^2 , и дифференцирование $[(1/r)d/dr]^\ell$ "убивает" ℓ первых членов этого ряда, оставляя константу. В итоге $R_{k\ell}^s \propto r^\ell$. Точно так же в "косинусном" решении при малых r имеем $\cos(kr)/r \sim 1/r$. Дифференцирования превращают $1/r$ в $r^{-(2\ell+1)}$. В итоге при $kr \rightarrow 0$ имеем в соответствии с (8.6)

$$R_{k\ell}^s \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{k(kr)^\ell}{(2\ell + 1)!!}; \quad R_{k\ell}^c \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{(2\ell + 1)!!}{r(kr)^\ell}.$$

• При $kr \gg 1$

$$-\frac{d}{dr} \left[\frac{\sin(kr + \alpha)}{r} \right] \rightarrow k \frac{\sin(kr + \alpha - \pi/2)}{r} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r^2}\right),$$

т.е. в этом пределе "выживает" только первый член и каждое дифференцирование сдвигает аргумент синуса или косинуса на $\pi/2$. В итоге

$$R_{k\ell}^s \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin(kr - \ell\pi/2)}{r}; \quad R_{k\ell}^c \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\cos(kr - \ell\pi/2)}{r}. \quad (8.10)$$

В реальном случае поле быстро убывает с расстоянием, при больших r движение практически свободное, и волновая функция есть суперпозиция решений (8.9). При $kr \gg 1$ её записывают в виде суперпозиции асимптотик (8.10)

$$\boxed{R_{k\ell}(r) \sim \frac{\sin(kr - \ell\pi/2 + \delta_\ell)}{r}}. \quad (8.11)$$

Получившийся *сдвиг фаз* δ_ℓ называют ещё *фазой рассеяния*. Чтобы найти её, надо решить соответствующее радиальное уравнение Шредингера и в окрестности начала координат.

□ Пример решения радиального уравнения даёт нам **компьютерное моделирование**. Центральнo-симметричный потенциал аппроксимируют последовательностью ступенек (по радиусу). В каждой из них решения имеют вид (8.9) с соответствующим k , действительным или мнимым (при $E - U_i < 0$). Правила сшивки на каждой границе те же, что и для обычного одномерного движения. Компьютер стартует с $r = 0$, где решение имеет форму $R^s(r)$. После последней границы должно получаться либо экспоненциально убывающее решение (дискретный спектр), либо решение в форме (8.11) (непрерывный спектр). В первом случае условие исчезновения растущей экспоненты даёт уровни энергии, во втором случае из решения получаются фазы рассеяния.

◆ *Квазиклассическое приближение для $R_{n\ell}(r)$.*

Для $\ell = 0$ центробежная энергия $\hbar^2\ell(\ell + 1)/(2mr^2)$ отсутствует, и получается одномерная задача на полупрямой (с условием $\chi(0) = 0$).

Для $\ell \neq 0$ в условие применимости квазиклассического приближения входит U_{eff} , а не U . Для малых r это сводится к условию $\ell \gg 1$. Можно показать, что правильная асимптотика $R(r)$ получается если в выражении для U_{eff} заменить $\ell(\ell + 1)$ на $(\ell + 1/2)^2$. (Это связано с тем фактом, что при малых r поведение U_{eff} вблизи точки поворота заметно отличается от случая однородного поля, который использовался при выводе квазиклассических условий квантования.) Следует помнить, что за счет центробежного члена обе точки поворота расположены при $r \neq 0$.

8.3. Кулоновская задача. Атом водорода

Описание строения атома – важнейшая задача квантовой механики. Для всех атомов такое описание строится по образцу того, что удаётся сделать для простейшего атома – атома водорода с гамильтонианом²

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}. \quad (8.12)$$

Мы рассмотрим только связанные состояния $E < 0$.

Введем естественные для задачи единицы – длины $a_B = \hbar^2/me^2 = 0.53 \cdot 10^{-8}$ см (боровский радиус) и энергии $R_y = me^4/2\hbar^2 = 13.6$ эВ (Ридберг). Затем перейдем к безразмерным величинам $r/a_B \rightarrow r$, $E/R_y \rightarrow E$. Тогда уравнение Шредингера (8.3а) примет вид

$$\frac{d^2\chi_\ell}{dr^2} + \left(E + \frac{2}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) \chi_\ell = 0$$

Нам известно поведение χ_ℓ на границах: $\chi_\ell \sim r^{\ell+1}$ при $r \rightarrow 0$ и $\chi_\ell \sim e^{-\varkappa r}$ при $r \rightarrow \infty$ (здесь $\varkappa = \sqrt{-E}$). Поэтому удобно искать решение в виде $\chi_\ell = r^{\ell+1}e^{-\varkappa r}w(r)$. Далее мы еще разложим $w(r)$ в ряд $w = \sum a_k r^k$. При этом получается уравнение для $w(r)$, а из него – рекуррентное соотношение для коэффициентов a_k :

$$rw'' + 2(\ell+1 - \varkappa r)w' + 2(1 - \varkappa - \varkappa\ell)w = 0.$$

$$a_{k+1} = 2 \frac{\varkappa(k+\ell+1) - 1}{(k+1)(k+2\ell+2)} a_k. \quad (8.13)$$

Видно, что $a_{k+1} \rightarrow 2\varkappa a_k/(k+1)$ при $k \rightarrow \infty$. Это значит, что $a_k \sim (2\varkappa)^k/k!$. Если ряд не обрывается, то при $r \rightarrow \infty$ он сходится к функции $w \sim e^{2\varkappa r}$, а это нарушает граничное условие. Чтобы $\chi_\ell \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, необходимо оборвать ряд³ на некотором $k = n_r$, при этом $\varkappa(n_r + \ell + 1) = 1$, и $w(r)$ – полином степени n_r . Эти полиномы называют функциями Лагерра $L_{n+\ell}^{2\ell+1}$. В итоге искомые нормированные собственные радиальные

²Для водородоподобного атома – ядра с зарядом Ze и одним электроном последующие результаты, очевидно, применимы с заменой $e^2 \rightarrow Ze^2$.

³ Это условие воспроизводит условие обращения в нуль коэффициента при растущей экспоненте для задачи об уровнях энергии в потенциальной яме.

функции имеют вид:

$$\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi);$$

$$R_{nl} = -\frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-\ell-1)!}{[(n+\ell)!]^3}} \left(\frac{2r}{n}\right)^\ell e^{-r/n} \cdot L_{n+\ell}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{n}\right). \quad (8.14)$$

(Коэффициенты первых радиальных функций удобнее вычислять непосредственно с помощью соотношений (8.13).)

Радиальное квантовое число n_r равно числу решений уравнения $w(r) = 0$. Это нетрудно понять, заметив, что рекуррентное соотношение (8.13) при $k \langle n_r$ имеет отрицательный числитель, т.е. коэффициенты полинома $w(r)$ знакопеременны и убывают с ростом k .

Волновые функции $R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi)$ описывают состояния атома водорода, обозначаемые как $|nlm\rangle$. Их обозначают также символом $n\ell$, например, $4f$ – состояние с $n = 4$, $\ell = 3$, а $2p$ – состояние с $n = 2$, $\ell = 1$. Энергию основного состояния $|1, 0, 0\rangle$ называют энергией ионизации атома $I = R_y = 13.6$ эВ. Это – минимальная энергия, которую надо сообщить находящемуся в основном состоянии электрону, чтобы он оторвался от ядра. Итак,

$$E_n = -\frac{1}{n^2},$$

$$n = n_r + \ell + 1 = 1, 2, 3, \dots, \quad n_r = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad \ell = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (8.15)$$

◆ **Кулоновское вырождение.** Энергии уровней атома водорода зависят только от главного квантового числа n , но не от n_r и ℓ по отдельности, как это было бы для почти любого другого сферически симметричного потенциала. Уровню E_n с данным значением n соответствует n^2 различных состояний (различных волновых функций)⁴ с $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$. Состояния с определённой энергией – суперпозиции состояний с разными ℓ уже не имеют определённой чётности. Это – более сильное вырождение, чем для обычной задачи с центрально-симметричным потенциалом (где имеется только вырождение по проекциям момента импульса с кратностью $2\ell + 1$). Такое дополнительное вырождение связано с существованием дополнительной, более высокой симметрии. В классическом случае

⁴ Мы увидим ниже, что дополнительно каждое из найденных состояний двукратно вырождено из-за наличия спина у электрона (его проекция на ось z может принимать значения $+1/2$ и $-1/2$), т.е. полная кратность вырождения есть $2n^2$.

эта дополнительная симметрия приводит к тому, что период радиального движения совпадает с периодом движения по углу, и траектория замкнута (эллипс) – в отличие от общего случая, когда эти периоды не совпадают, и траектория не замкнута. В.А. Фок показал, что эта симметрия эквивалентна симметрии вращений в некотором четырехмерном пространстве. Технически это обусловлено тем, что здесь существует ещё один сохраняющийся векторный оператор (Рунге–Ленца), в некоторых отношениях подобный оператору момента импульса, см. задачу (19). (Подобная более высокая симметрия имеет место для трехмерного осциллятора с $U(r) = kr^2/2$. Здесь имеется дополнительный сохраняющийся оператор $\hat{T}_{ij} = \hat{p}_i\hat{p}_j/m + k\hat{x}_i\hat{x}_j$, не коммутирующий с оператором \hat{L}^2 .)

• Примеры. Частные случаи

◆ *Состояния с $\ell = n-1$.* Для таких состояний $n_r = 0$, поэтому w – постоянная. Используя при нормировке (А.5), (А.6), найдем

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

В частности, волновая функция основного состояния атома водорода имеет вид:

$$\langle \vec{r} | 100 \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r}. \quad (8.16a)$$

Используя соотношения для Γ -функции из Приложения, найдем, что в таком состоянии

$$\langle r \rangle = n \left(n + \frac{1}{2} \right); \quad \frac{\Delta r}{\langle r \rangle} = \frac{1}{\sqrt{2n+1}}. \quad (8.16b)$$

У основного ($1s$) состояния $\langle r \rangle = 3/2$, $\Delta r / \langle r \rangle = 1/\sqrt{3}$, т.е. нет ничего общего с наглядной моделью Бора, для которой $\langle r \rangle = 1$, $\Delta r = 0$ (не говоря уже о том, что в $1s$ – состоянии момент $L = 0$, а в модели Бора в основном состоянии $L = \hbar$). Напротив, при $\ell = m = n - 1 \gg 1$ квантовая механика дает ответ, близкий к боровской модели. А именно, средний радиус велик $\langle r \rangle \propto n^2$, относительная дисперсия мала $\Delta r / \langle r \rangle \ll 1$, в угловом распределении $|Y_{\ell\ell}|^2 \propto \sin^{2\ell} \theta$ вероятность найти электрон сконцентрирована в узком интервале углов вблизи $\theta = \pi/2$, что очень похоже на классическую траекторию в форме окружности радиуса n^2 в плоскости xy .

Подчеркнём, что ценность полуклассической боровской модели не исчерпывается случаем больших n и ℓ . Представление об орбитах и их

радиусах (8.16b) позволяет получать правильные оценки и в случаях, когда n и ℓ не велики. В этом случае точность оценок не очень высока, но в ряде задач и её достаточно.

◆ *Первый возбужденный уровень $n = 2$.* Векторы состояний легко вычисляются с помощью (8.13) и (7.18):

$$\begin{aligned}
 2s : \quad & \langle \vec{r} | 2, 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \left(1 - \frac{r}{2}\right) e^{-r/2}, \\
 2p : \quad & \left\{ \begin{aligned}
 \langle \vec{r} | 2, 1, 1 \rangle &= -\frac{i}{8\sqrt{\pi}} r e^{-r/2} \sin \theta e^{i\phi}, \\
 \langle \vec{r} | 2, 1, 0 \rangle &= \frac{i}{\sqrt{32\pi}} r e^{-r/2} \cos \theta, \\
 \langle \vec{r} | 2, 1, -1 \rangle &= \frac{i}{8\sqrt{\pi}} r e^{-r/2} \sin \theta e^{-i\phi}.
 \end{aligned} \right. \quad (8.16c)
 \end{aligned}$$

◇ *Спектральные линии.* Энергии фотонов, излученных при переходе из состояния $|n_i \ell_i m_i\rangle$ в состояние $|n_f \ell_f m_f\rangle$, – это $R_y (1/n_f^2 - 1/n_i^2) = \hbar\omega$. Для $n_f = 1$ мы имеем серию Лаймана в ультрафиолетовой области спектра, для $n_f = 2$ – серию Бальмера (четыре линии $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, H_\delta$, соответствующие $n_i = 3, 4, 5, 6$, лежат в видимой области спектра), для $n_f \geq 3$ все линии лежат в инфракрасной области спектра.

◆ *Водородоподобные атомы* – атомы, имеющие ядро с зарядом Ze и один электрон (сильно "ободранные" ионы). Для них размер a_B уменьшается, а энергии связи $|E_n|$ увеличиваются в Z^2 раз.

■ Применения.

• **А. Атом в электрическом поле.** Сдвиг спектральных линий в электрическом поле называют *эффектом Штарка*.

Рассмотрим энергии уровней в электрическом поле. Характерные поля в атоме составляют $\mathcal{E}_{at} \sim R_y/ea_B \approx 3 \cdot 10^9$ В/см, а это значительно больше любого поля, которое создают в лаборатории. Поэтому практически всегда воздействие внешнего поля на атом можно считать малым, и при вычислении использовать теорию возмущений. Кроме того, в большинстве случаев можно считать, что в пределах атомной системы изменением поля с расстоянием можно пренебречь, т.е. считать внешнее поле однородным. Мы направляем обычно ось z вдоль этого поля.

Для атома в электрическом поле $V = -\mathbf{d}\mathcal{E}$, где \mathbf{d} – электрический дипольный момент атома, $\mathbf{d} = \sum_{\mathbf{a}} (\mathbf{r}_{\mathbf{a}} - \mathbf{R})$ (\mathbf{R} – координата ядра, ниже мы помещаем его в начало координат). Для атомного состояния $|N\rangle$ поправка первого порядка к энергии есть $-\langle N | \mathbf{d}\mathcal{E} | N \rangle \equiv -\langle N | d_z | N \rangle \mathcal{E}$ Для

всех атомных систем, кроме атома водорода, собственные состояния одновременно являются собственными состояниями момента импульса, и имеют определённую чётность. В то же время при отражении координат (замена переменных под интегралом) дипольный момент меняет знак, т.е. меняет знак и величина $\langle N|d_z|N\rangle$, а это значит, что она равна нулю. Итак, в первом приближении теории возмущений поправка к энергии отсутствует, т.е. нет поправки к энергии, линейной по полю. Разумеется, существует такая поправка (квадратичная по полю) во втором порядке теории возмущений. На классическом языке это соответствует "наведённому" дипольному моменту, возникшему под действием того же поля.

Приведённое рассуждение не работает для атома водорода при $n > 1$. В этом случае имеется дополнительное вырождение по ℓ , т.е. и по чётности, и электрическое поле снимает это вырождение по стандартным правилам теории возмущений для случая вырождения. При этом изменение энергии уровней пропорционально полю.

• **A1. Квадратичный эффект Штарка. Поляризуемость**

Напомним, что если в состоянии $\langle k|$ среднее $\langle k|\vec{d}|k\rangle = 0$, то $E_k^1 = 0$, и для произвольного атома поправка к энергии

$$\Delta E = E^{(2)} = \sum_{p \neq k} \frac{|\langle k|\vec{d}\vec{\mathcal{E}}|p\rangle|^2}{E_k^0 - E_p^0} \equiv -\beta_{Pij}^k a_B^3 \mathcal{E}_i \mathcal{E}_j / 2.$$

В силу сферической симметрии задачи, $\beta_{Pij}^k = \beta_P^k \delta_{ij}$. Величина $\alpha \equiv \beta_P^k a_B^3$ называется *поляризуемостью* в состоянии k :

$$\beta_P^k = \frac{2}{a_B^3} \sum \frac{\langle k|d_z|p\rangle \langle p|d_z|k\rangle}{E_p^0 - E_k^0} \equiv \sum \frac{|\langle k|d_z|p\rangle|^2}{E_p^0 - E_k^0}. \quad (8.17)$$

Для поляризуемости в основном состоянии β_P^0 нетрудно получить простые оценки, заметив, что в этом случае все слагаемые в нашей сумме положительны. Если заменить все знаменатели на наименьший, т.е. заменить $E_p^0 - E_0^0 \rightarrow E_1^0 - E_0^0$, то правая часть увеличится:

$$\beta_P^0 < \frac{2}{a_B^3} \frac{\sum_{p \neq 0} |\langle 0|d_z|p\rangle|^2}{E_1^0 - E_0^0}.$$

Но сумму в числителе можно преобразовать, используя полноту системы состояний $|p\rangle$ к виду

$$\sum_{p \neq 0} |\langle 0|d_z|p\rangle|^2 \equiv \sum_{p \neq 0} \langle 0|d_z|p\rangle \langle p|d_z|0\rangle = \langle 0|d_z^2|0\rangle.$$

Если пренебречь состояниями непрерывного спектра (которые действительно дают очень малый вклад в сумму), то наименьший возможный знаменатель получается при $E_p = 0$. В итоге получаем оценку

$$2 \frac{\langle 0 | d_z^2 | 0 \rangle}{|E_0|} \lesssim \beta_P^0 a_B^3 \langle 2 | \frac{d_z^2}{E_1 - E_0} | 0 \rangle. \quad (8.18)$$

В частном случае атома водорода в основном состоянии эта оценка выглядит как $4 < \beta_P^0 < 16/3$. Точный расчёт даёт $\beta_P^0 = 4.5$.

А2. Эффект Штарка для атома водорода с $n=2$.

Для возбуждённых состояний атома водорода имеет место вырождение по ℓ , т.е. и по чётности. Под действием электрического поля атом переходит в состояния, которые не являются собственными функциями ℓ . Всё это описывается стандартной теорией возмущений для случая вырожденных состояний.

Простейший пример даёт атом водорода с $n = 2$. В отсутствие поля 4 вырожденных состояния можно записать в виде базиса (8.16с) состояний с определённой чётностью. Запишем теперь оператор возмущения в виде матрицы, как это делалось в разд. 5.2.2. Как отмечалось выше, все диагональные матричные элементы возмущения обращаются в нуль. Направив ось z вдоль поля, запишем возмущение в виде $V = e\mathcal{E}z \equiv e\mathcal{E}r \cos\theta$. Под действием такого возмущения ℓ_z сохраняется. Значит, матричные элементы $\langle 2, \ell, 0 | V | 2, 1, \pm 1 \rangle$, $\langle 2, \ell, \mp 1 | V | 2, 1, \pm 1 \rangle$ обращаются в нуль (в координатном представлении это соответствует обращению в нуль интегралов по ϕ из-за множителя $e^{\pm i\phi}$ под интегралом). В два остающихся матричных элемента входят состояния с противоположными чётностями и одинаковым значением $m = 0$. Поэтому они отличны от нуля: $\langle 2, 1, 0 | V | 2, 0, 0 \rangle = (\langle 2, 0, 0 | V | 2, 1, 0 \rangle)^* = i\Delta$, $\Delta = 3e\mathcal{E}a_B$. В итоге секулярное уравнение имеет вид $(E^{(1)})^2 [(E^{(1)})^2 - \Delta^2] = 0$. Его решения дают сдвиг уровней в электрическом поле. Два состояния $|2, 1, \pm 1\rangle$ не смешиваются, для них уровни не сдвигаются, $E_{1,2}^{(1)} = 0$. Два других состояния $|2, \ell, 0\rangle$ смешиваются, и уровни сдвигаются, обеспечивая линейный эффект Штарка: $E_{3,4}^{(1)} = \pm\Delta$. При этом новые состояния имеют вид $|\pm\rangle = (|2, 0, 0\rangle \mp |2, 1, 0\rangle)/\sqrt{2}$.

Б. Силы Ван дер Ваальса.

Рассмотрим теперь взаимодействие нейтральных атомов, находящихся на расстоянии R , большом по сравнению с их "размерами". Здесь можно пользоваться *адиабатическим приближением*, которое состоит в

том, что движения электронов в атомах и атомов, как целого, разделяются, т.е. на электроны каждого из атомов другой атом воздействует как целое, и атомы не обмениваются электронами.

На больших расстояниях R два атома взаимодействуют как диполи $\vec{d}_i = e\vec{r}_i$ ($i = 1, 2$), и

$$V = \frac{3(\mathbf{d}_1\mathbf{n})(\mathbf{d}_2\mathbf{n}) - \mathbf{d}_1\mathbf{d}_2}{|\mathbf{R}|^3} \equiv \frac{d_{1\alpha}d_{2\beta}}{R^3} N_{\alpha\beta} \equiv R_y v \left(\frac{a_B}{R}\right)^3, \\ \left(\mathbf{n} = \frac{\mathbf{R}}{R}, \quad N_{\alpha\beta} = 3n_\alpha n_\beta - \delta_{\alpha\beta}\right).$$

Поправку к энергии основного состояния за счет взаимодействия можно записать в виде

$$U(R) = \sum \frac{\langle 0|V|n_1 n_2\rangle \langle n_1 n_2|V|0\rangle}{2E_0 - E_{n_1} - E_{n_2}} \equiv -2R_y \eta_V \left(\frac{a_B}{R}\right)^6.$$

Угловое усреднение с учётом сферической симметрии атомов даёт

$$\eta_V = 3R_y \sum_{pq} \frac{|\langle 0|d_{1z}^2|p\rangle|^2 |\langle 0|d_{2z}^2|q\rangle|^2}{E_p + E_q - 2E_0}. \quad (8.19)$$

Вычисление, подобное сделанному выше для поляризуемости, даёт

$$\frac{3}{2R_y a_B^3} \frac{\langle 0|d_z^2|0\rangle^2}{E_1 - E_0} \eta_V \gtrsim \frac{3}{2R_y a_B^3} \frac{\langle 0|d_z^2|0\rangle^2}{|E_0|}.$$

Для взаимодействия двух атомов водорода в основном состоянии это даёт $8 > \eta \gtrsim 6$. Аккуратный расчет дает $\eta_V \approx 6.5$.

8.4. Задачи

1. Для прямоугольной сферически симметричной потенциальной ямы
 - Докажите условие (8.4).
 - Рассмотреть предельный переход $U \rightarrow \infty$, $a \rightarrow 0$. При каком условии в пределе остается связанное состояние?
2. Могут ли быть в центрально-симметричном поле уровни с кратностью вырождения 2, 7, 9? Какому вырождению по ℓ они могут соответствовать?
3. Определить уровни энергии $E_{n\ell}$ электрона с моментом ℓ , заключенного в непроницаемую сферу радиуса R , используя квазиклассическое правило квантования. Сравнить с точным решением при больших R и $n \gg \ell$.

4. Найти уровни плоского осциллятора $U = m\omega^2(x^2 + y^2)/2$. Описать вырождение в терминах проекции момента импульса.
5. Покажите, что уровни энергии сферического осциллятора описываются соотношением $E = \hbar\omega(n + 3/2)$ с кратностью вырождения $(n + 1)(n + 2)/2$. Покажите, что в состоянии с данным значением n представлены все значения $\ell = n, n - 2, n - 4, \dots$
6. Для сферического осциллятора найти уровни энергии в квазиклассическом приближении. Найти минимальное значение энергии при заданном ℓ . Сравнить с точным решением.
7. Для сферического осциллятора найти уровни энергии с $n_r = 0, \ell = 0, 1$ и $n_r = 1, \ell = 0$, пользуясь вариационным методом с пробными функциями вида $P(r)e^{-r/a}$ ($P(r)$ – простейшие полиномы). Сравнить с точным решением.
8. Найти поправки к трем нижним уровням энергии сферического осциллятора $U = m\omega^2 r^2/2$ под действием возмущения $V = \gamma x^2 y^2$.
9. Для атома водорода в основном состоянии ($1s$) построить графики dW/d^3r и dW/dr в зависимости от r . Найти $\phi_{100}(p)$ и построить графики dW/d^3p и dW/dp . Найти $\langle \vec{p} \rangle$, $\langle p \rangle$ и Δp , $\langle r \rangle$ и Δr . Оценить напряженность электрического поля на расстоянии $r = a_B$ от ядра.
10. Для $2s$ - и $2p$ - состояний построить графики dW/d^3r в зависимости от r и θ . Найти среднее магнитное поле, создаваемое электроном в центре атома водорода в состоянии $2p$.
11. Найти средние значения кинетической и потенциальной энергии для различных состояний атома водорода.
12. Оценить размеры и уровни энергии водородоподобных атомов He^+ , Li^{++} , Pb^{82+} , e^+e^- , μ^-p , $\mu^-\pi^+$, μ^-Pb^{82+} (Pb^{82+} – ядро свинца).
13. Найти поправки к энергии водородоподобного атома, обусловленные возмущением $\Delta V = \gamma \hbar^2/2mr^2$ (моделирующим эффект поляризуемости атомного остатка под действием валентного электрона).
Использовать два метода: дифференцирование энергии по параметру (5.11) и введение нового эффективного момента импульса $\ell'(\ell' + 1) = \ell(\ell + 1) + \gamma$. Сравнить результаты.
С помощью второго из этих подходов выделить колебательные и вращательные уровни.

Ответ (для малых γ):

$$E_{n\ell} = -\frac{Z^2 R_y}{2n^2} \cdot \left(1 + \frac{8\gamma}{n(2\ell + 1)} \right).$$

14. Найти поправки к энергии атома водорода, обусловленные конечными размерами ядра.
15. Найти релятивистские поправки к энергии атома водорода ($\hat{p}^2/2m \rightarrow \sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 = \hat{p}^2/2m - \hat{p}^4/8m^3 c^2 + \dots$).
Указание: Использовать соотношение $\hat{p}^2 = 2m(\hat{H}_0 + e^2/r)$ с невозмущенным гамильтонианом атома водорода H_0 .
16. При каких значениях коэффициентов A и B в векторе состояния $|N\rangle = A|2, 1, 0\rangle + B|2, 0, 0\rangle$ среднее значение дипольного момента $\langle N | -e\vec{r} | N \rangle = \langle \vec{d} \rangle$ максимально? Найти величину $\langle d \rangle$ при этом.
17. Улучшить оценки (8.18), (8.19) для атома водорода в основном состоянии, учтя точно слагаемые, отвечающие первым возбуждённым состояниям.
18. Найти поправки к уровням энергии с $n = 1, 2$ для потенциала Юкавы $U = -ge^{-\mu r}/r$ и потенциала $U = -ge^{-(\mu r)^2}/r$, рассматривая отклонение поля от кулоновского как возмущение. Рассмотреть случаи $\mu a_B \ll 1$ и $\mu a_B \gg 1$.
 Решить ту же задачу для $n = 1$ вариационным методом, используя водородоподобные и осцилляторные волновые функции. Сравнить результаты.
19. Рассмотрите оператор Рунге–Ленца

$$\hat{\mathbf{A}} = \frac{\hbar}{2m} \left\{ [\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{L}}] - [\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{p}}] \right\} - \frac{e^2 \hat{\mathbf{r}}}{r}. \quad (8.20)$$

а) Найдите перестановочные соотношения $[\hat{A}_i, \hat{A}_j]$, $[\hat{A}_i, \hat{\mathbf{A}}^2]$.

Покажите, что

б) $[\hat{\mathbf{A}}_i, H] = 0$.

в) $[\hat{\mathbf{A}}_i, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0$.

г) $[\hat{\mathbf{A}}_i, \hat{\mathbf{L}}_j] = ie_{ijk} \hat{\mathbf{A}}_k - \text{ср. (1.33), но } \{\hat{\mathbf{A}}_i, \hat{\mathbf{L}}_j\}_+ = 0$.

д) Оператор $\hat{\mathbf{A}}^2$ не коммутирует с оператором пространственного отражения, т.е. общие собственные состояния операторов гамильтониана и $\hat{\mathbf{A}}^2$ не имеют определённой чётности.

Глава 9

СПИН. ЧАСТИЦА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

9.1. Спин

Квантовая частица может иметь квантовые внутренние степени свободы, подобные моменту, отсутствующие у классических частиц. Их квантовая природа означает, что соответствующие величины исчезают в классическом пределе. Поэтому такие величины должны быть пропорциональны постоянной Планка \hbar .

Пример. У ядра есть собственный орбитальный момент L . В классическом случае $L = mvr$ стремится к нулю при $r \rightarrow 0$. В квантовой теории этот момент остается конечным и при исчезающе малых размерах ядра, поскольку единица квантования момента \hbar от размеров ядра не зависит.

Внутренние степени свободы не связаны с какими-либо пространственными координатами. В то же время полученный ранее вывод о том, что значения момента есть $\hbar\ell$ с целым ℓ , основывался на связи оператора момента с пространственными координатами. Если теперь **принять**, что эта внутренняя степень свободы подобна моменту импульса, т.е. описывается переменными с перестановочными соотношениями (7.2), то с учетом (7.11) переменная, отвечающая внутренней степени свободы и подобная квадрату момента, может принимать значения $\hbar^2\ell(\ell + 1)$ не только с целыми ℓ , но и с $\ell = 1/2, 3/2, 5/2, \dots$ и соответствующими собственными значениями оператора $\ell_z = \ell, \ell - 1, \dots$

В опытах Штерна и Герлаха нейтральные атомы пролетали через неоднородное магнитное поле, где средняя действующая на атом сила $F = \mu_z \partial B_z / \partial z$ в классической механике может принимать любые значения в пределах $\pm \mu \partial B_z / \partial z$, что должно было приводить к размытию

на пластинке линии, вдоль которой осаждаются пролетевшие атомы. В соответствии с изложенным в разд. 9.2.1, квантованность значений μ_z приводит к появлению на пластинке $2\ell + 1$ полос.

Для водорода и серебра на пластине оказалось по две полосы, что формально соответствует $\ell = 1/2$. Этот факт можно связать с внутренней степенью свободы электрона, похожей на момент. Ее назвали спином.

■ В релятивистской квантовой теории трудно обойтись без понятия спина. В нерелятивистской квантовой механике постулируется, что **частицы могут иметь внутреннюю степень свободы, не связанную с пространственным движением и называемую спином. Оператор спина — вектор $\hat{S} \equiv \hbar\hat{s}$. Перестановочные соотношения для компонент этого вектора такие же, как и для компонент оператора момента импульса (7.2), т.е.**

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = ie_{ijk}\hat{s}_k; \quad [\hat{s}^2, \hat{s}_i] = 0. \quad (9.1)$$

Величина спина s (собственное значение оператора $\hat{s}^2 = s(s+1)$) — свойство данного сорта частиц.

Как и для момента импульса, собственные состояния спина можно классифицировать по значениям его проекции на какую-нибудь ось. Собственные значения операторов \hat{s}^2 и \hat{s}_z находят так же, как и для оператора момента (см. разд. 7.1). Отличие в том, что здесь нет представления \hat{s}_z в пространственных координатах (это — внутренняя степень свободы!). Поэтому число s не обязано быть целым. В соответствии с (7.11) разрешено и $s = 1/2$. Результаты Штерна и Герлаха показывают, что именно такое значение реализуется для электрона. (Это значение естественно получается в релятивистской теории.)

В природе реализуются частицы с разными значениями спина:

- Спин 0 — α — частицы (ядра ${}^4_2\text{He}$), π и K — мезоны, бозон Хиггса.
- Спин 1/2 — электроны, нейтрино, протоны, нейтроны, кварки, ${}^3_2\text{He}$.
- Спин 1 — фотоны, W - и Z - бозоны (переносчики слабых взаимодействий), ρ — мезоны, дейтоны (ядра ${}^2_1\text{H}$).
- Спин 3/2 — ядра ${}^7\text{Li}$, ${}^9\text{Be}$, ${}^{21}\text{Na}$.
- Спин 2 — гравитоны (?), ядра ${}^8\text{Li}$.
- Существуют ядра и с более высокими значениями спина.

Далее говоря о спиновых частицах, мы будем иметь в виду частицы со спином 1/2 — электроны, протоны, нейтроны, ...

Поскольку значение s для электронов фиксировано, мы не будем указывать эту величины в обозначении собственных векторов $|s, s_z\rangle$. Соб-

ственные векторы $|s = \frac{1}{2}, s_z = \pm \frac{1}{2}\rangle$ мы будем обозначать просто $|\pm\rangle$.

Любое спиновое состояние $\chi = a_1|+\rangle + a_2|-\rangle$, причем $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$; числа a_i — функции координат и времени. Это состояние записывают в виде столбца, который называют *спинором*

$$\chi \equiv |\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}.$$

Сопряженный вектор состояния (спинор) $\langle |$ — строка $\chi^\dagger \equiv \langle | = (a_1^*, a_2^*)$.

Набор матричных элементов $\langle sm|\hat{s}_i|sm'\rangle$, который получается из (7.12) и из определения \hat{s}_z , удобно представить в виде матриц, подобных (7.13); их называют **матрицами Паули**:

$$\hat{s}_i \equiv \frac{\hat{\sigma}_i}{2} : \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (9.2)$$

Легко проверить, что выполняются соотношения

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = I \cdot \delta_{ij} + ie_{ijk} \hat{\sigma}_k, \quad \hat{\sigma}_i^2 = I, \quad Tr I = 2, \quad Tr \hat{\sigma}_i = 0. \quad (9.3)$$

Обычно спиновое и пространственное движения разделяются, и можно записать

$$\psi(q) = \psi(\vec{r}) \cdot \chi(s_z). \quad (9.4)$$

(Мы ввели здесь обобщенные координаты $q \equiv (r_i, s_z)$.)

◇ *Замечание: Разложение по базису матриц Паули — удобный способ работы при описании объектов с двумя возможными состояниями (спиновых систем, двухуровневых систем, двоичных элементов памяти и т.п.).* Так, любую 2×2 матрицу A можно представить в виде

$$A = a \cdot I + \vec{b} \cdot \vec{\sigma}; \quad a = \frac{Tr A}{2}, \quad \vec{b} = \frac{Tr(A\vec{\sigma})}{2}. \quad (9.5)$$

В частности, рассмотрим изменение системы с двумя вырожденными или близко расположенными уровнями ε_1 и ε_2 под действием возмущения \mathcal{V} с матричными элементами по этим состояниям V_{ij} ($i, j = 1, 2$) (раздел 5.2.3). Уровни энергии такой системы — собственные числа матрицы $||\varepsilon + \mathcal{V}|| \equiv \begin{pmatrix} V_{11} + \varepsilon_1 & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} + \varepsilon_2 \end{pmatrix}$. Разложим эту матрицу по матрицам Паули (9.5), $||\varepsilon + \mathcal{V}|| = a \cdot I + \sum_i b_i \cdot \sigma_i$. Уровни энергии — собственные значения этой матрицы. Унитарное преобразование, диагонализующее эту матрицу, приводит её к форме $a \cdot I + b \cdot \sigma_3$ с собственными значениями $a \pm b$. Это преобразование отвечает вращению вектора \vec{b} , при этом $b = \sqrt{b_1^2 + b_2^2 + b_3^2}$.

9.2. Движение частицы в магнитном поле

9.2.1. Магнитный момент заряженной частицы

В классической теории магнитный момент атома обусловлен движением электронов $\mu = \sum \mathbf{e}_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a / 2c = -(|e|/2mc) \cdot \mathbf{L}$, где L — момент импульса системы электронов. Взаимодействие нейтрального атома с внешним магнитным полем \vec{B} описывается добавкой $V = -(\mu \mathbf{B})$ к энергии (функции Гамильтона). В неоднородном магнитном поле на такой атом действует сила $-\nabla V$.

В квантовой механике $\hat{\mathbf{L}} = \hbar \hat{\ell}$, и потому для частиц без спина оператор $\hat{\mu} = \mu_B \hat{\ell}$. Величину $\mu_B = |e|\hbar/2mc$ называют магнетон Бора. Проекция магнитного момента на ось z , $\mu_z = -\mu_B \ell_z$ принимает дискретный ряд значений $-\mu_B \ell, -\mu_B(\ell - 1), \dots, \mu_B \ell$. Гамильтониан взаимодействия с внешним магнитным полем имеет вид:

$$\hat{H}_M = -\mu_B \hat{\ell} \vec{B}. \quad (9.6)$$

Наличие спина приводит к существованию дополнительного (спинового) магнитного момента, который по другому связан со спином:

$$\hat{\mu}_i = g_i \mu_{Bi} \hat{\mathbf{s}}. \quad (9.7)$$

Здесь $\mu_{Bi} \equiv e\hbar/2m_i c$ — магнетон Бора для частиц сорта i (электронов, протонов,...). В отличие от орбитального движения спин может породить магнитный момент и у нейтральной частицы, например, у нейтрона. Наличие такого момента — сигнал существования нетривиальной внутренней структуры частицы.

Если пренебречь взаимодействием с колебаниями вакуума, то $g_i = 2$ для заряженных частиц, и $g_i = 0$ для нейтральных частиц. Учет этих колебаний приводит к небольшим отличиям для электронов и к большим — для протонов и нейтронов:

$$g_e/2 = 1.001159625; \quad g_p/2 = 2.79; \quad g_n/2 = -1.91. \quad (9.8)$$

Далее, говоря об электроне, мы будем считать $g_e = 2$ (хотя отличие g_e от 2 всерьез используется в ускорительной технике).

9.2.2. Уравнение Шредингера

Для частицы в электромагнитном поле импульс связан со скоростью соотношением $\vec{p} = m\vec{v} + e\vec{A}/c$, где \vec{A} — вектор — потенциал электромагнитного поля. Поэтому классическая функция Гамильтона имеет вид

$H = (\vec{p} - e\vec{A}/c)^2/2m + e\phi(r)$ (см. решение задачи 8 главы 3). Соответственно, гамильтониан электрона в электромагнитном поле с учетом спинового магнитного момента имеет вид (получен в 1927г. В. Паули):

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\vec{p}} - e\vec{A}/c)^2}{2m} + e\phi(r) - (\hat{\vec{\mu}}_e \vec{B}). \quad (9.9)$$

Нетрудно проверить, что отсюда следует квантовая версия исходного равенства $d\vec{r}/dt = [\vec{r}, \hat{H}]/i\hbar = (\hat{\vec{p}} - e\vec{A}/c)/m$.

Пусть неоднородность внешнего поля на атомных размерах невелика, т.е. магнитное поле B можно считать однородным. Выберем вектор-потенциал в виде $\vec{A} = -[\vec{r} \times \vec{B}]/2$. Тогда, раскрывая скобки, запишем:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + e\phi(\vec{r}) - 2\mu_B \vec{s} \vec{B} + \frac{e}{2mc} \hat{p} [\vec{r} \times \vec{B}] + \frac{e^2 [\vec{r} \times \vec{B}]^2}{8mc^2}.$$

Учитывая, что $[\vec{r} \times \hat{p}] = \vec{L} \equiv \hbar \vec{\ell}$, получаем отсюда (ср. (9.6))

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + e\phi(\vec{r}) - \mu_B (\vec{\ell} + 2\vec{s}) \vec{B} + \frac{e^2 [\vec{r} \times \vec{B}]^2}{8mc^2}. \quad (9.10)$$

При описании атомных систем характерные смещения не очень велики, тогда последним слагаемым можно пренебречь, и взаимодействие с магнитным полем записывается в виде

$$U = -\mu_B (\vec{\ell} + 2\vec{s}) \vec{B}. \quad (9.11)$$

При описании свободного движения характерные смещения могут быть не малыми, тогда слагаемое квадратичное по полю становится важным.

■ Калибровочная инвариантность

Нетрудно проверить, что уравнение Шредингера не изменяется при одновременных преобразованиях

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

(Здесь $f(\vec{r}, t)$ — произвольная функция координат и времени.) Это свойство называют калибровочной инвариантностью.

Можно стартовать и с инвариантности вероятностей относительно изменения фазы волновой функции (одинаковой во всем пространстве и не зависящей от времени). Естественное обобщение этого — возможная инвариантность относительно фазы, меняющейся в пространстве и времени. Чтобы такая инвариантность имела место, изменения в величине

$\hat{p}^2\psi e^{i\phi(\vec{r})}$ должны быть скомпенсированы изменениями в слагаемых, отвечающих взаимодействию. Электромагнитное поле с выписанными преобразованиями как раз и компенсирует эти изменения. Поэтому электромагнитное поле можно рассматривать как компенсирующее поле по отношению к нашим преобразованиям. Если бы мы не знали заранее о его существовании, мы предположили бы, что такое компенсирующее поле должно быть в Природе.

Эта идея для фазовых преобразований более общего вида была выдвинута в 1954 г. Янгом и Миллсом. Она составила основу современного описания взаимодействий элементарных частиц, состоящего из единой теории электромагнитных и слабых взаимодействий и квантовой хромодинамики. В теории электрослабых взаимодействий частицами компенсирующих — *калибровочных* — полей являются фотон и его аналоги — W - и Z - бозоны со спином 1 и с массами в 85–100 раз тяжелее протона. Они обнаружены в 70-х гг. В квантовой хромодинамике частицы калибровочного (компенсирующего) поля называются глюонами, они не могут улетать далеко от своих источников.

9.2.3. Электрон в однородном магнитном поле

Для свободного электрона последний член гамильтониана (9.10) становится определяюще важным, и гамильтониан не сводится к простому выражению (9.11). Кроме того, в этом случае пространственные и спиновые степени свободы практически не взаимодействуют.

Выберем векторный потенциал в виде, отличающемся от использованного выше: $\vec{A} = (0, xB, 0)$. Тогда (при $\phi = 0$)

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_z^2}{2m} + \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{(\hat{p}_y - \frac{exB}{c})^2}{2m} + \mu\sigma_z B.$$

Мы видим, что $[\hat{H}, \hat{p}_z] = [\hat{H}, \hat{p}_y] = 0$. Поэтому p_z и p_y сохраняются.

Ищем теперь ψ в виде $\exp\left(i\frac{yp_y + zp_z}{\hbar}\right)\phi(x)$. Тогда в Гамильтонане уравнения Шредингера для функции $\phi(x)$ операторы \hat{p}_z и \hat{p}_y заменяются на числа p_z и p_y , т.е. это уравнение принимает вид

$$\frac{\hat{p}_x^2}{2m}\phi(x) + \frac{m\omega_B^2(x - x_0)^2}{2}\phi(x) = (E - \mu_B\sigma_z B - \frac{p_z^2}{2m})\phi(x),$$

где $\omega_B = eB/(mc)$ и $x_0 = cp_y/(eB)$.

Это уравнение по форме совпадает с уравнением Шредингера для осциллятора с частотой ω_B (и с положением минимума x_0). Поэтому энергии уровней таковы (уровни Ландау):

$$E = \hbar\omega_B(n + 1/2 + \sigma_z) + p_z^2/2m, \quad \sigma_z = \pm 1. \quad (9.12)$$

□ Полученные уровни бесконечнократно вырождены по p_y даже при фиксированном продольном импульсе p_z . Однако, *кратность вырождения становится конечной для движения, ограниченного конечной площадью $S = XY$* . Ограничение возникает из требования, чтобы центр орбиты помещался в нашей площадке.

Напомним, что операторы координат центра орбиты $\hat{x}_c = \hat{x} + \hat{v}_y/\omega_B$, $\hat{y}_c = \hat{y} - \hat{v}_x/\omega_B$ по отдельности сохраняются, (но не одновременно – они не коммутируют друг с другом) – см. задачу 3.8. В частности, x -координату центра орбиты определяет введённая выше величина x_0 .

Мы рассмотрим случай, когда оба размера велики по сравнению с радиусом орбиты, и можно использовать квазиклассические оценки. В соответствии с (5.28), число различных значений p_y в интервале Δp_y равно $\Delta p_y Y / (2\pi\hbar)$. Из условия, что центр орбиты лежит внутри нашей области, $0 < x_0 < X$, получается $\Delta p_y = eBX/c$. В итоге при заданных n и p_z кратность вырождения (число состояний) есть

$$g = eBS / (2\pi\hbar c). \quad (9.13)$$

■ При переходе к другой форме (*калибровке*) векторного потенциала получаются те же собственные значения энергии, но с другим набором собственных функций. В частности, полезно описать решение той же задачи в цилиндрических координатах (ρ, ϕ, z) и для **случая, когда электрон обладает определённым значением $\hbar m$ проекции момента импульса на ось z** . Для этого удобно использовать вектор-потенциал в виде $\vec{A} = [\vec{B}, \vec{r}^\dagger]/2 = (A_\rho, A_\phi, A_z) \equiv (0, B\rho/2, 0)$. При этом можно выполнить разделение переменных $\psi = e^{im\phi + ip_z z/\hbar} R(\rho)/\sqrt{2\pi}$, и уравнение Шредингера для функции $R(\rho)$ принимает вид (ниже мы обозначаем массу электрона через M и не выписываем спиновый вклад)

$$R'' + \frac{1}{\rho}R' - \frac{m^2}{\rho^2}R + \left[\frac{2ME}{\hbar^2} - \frac{p_z^2}{\hbar^2} - \frac{mM\omega_B}{\hbar} - \left(\frac{M\omega_B}{2\hbar} \rho \right)^2 \right] R = 0.$$

Введя переменную $\xi = \left(\frac{M\omega_B}{2\hbar} \rho \right)^2$ и обозначая $\beta = \left[\frac{E - p_z^2/2M}{\hbar\omega_B} - \frac{m}{2} \right]$, перепишем это уравнение в виде

$$\xi R'' + R' + [-\xi/4 + \beta - m^2/(4\xi)]R = 0.$$

Нетрудно установить, что $R \rightarrow e^{-\xi/2}$ при $\xi \rightarrow \infty$, а при $\xi \rightarrow 0$ получается $R \rightarrow \xi^{|m|/2}$. Поэтому удобно искать решение в виде $R(\xi) = e^{-xi/2} \xi^{|m|/2} w(\xi)$. Для функции $w(\xi)$ получается уравнение, которое решается с помощью разложения в ряд по той схеме, которая была использована в разд. 8.3 для атома водорода. При произвольном значении β волновая функция растёт при $\xi \rightarrow \infty$ как $e^{\xi/2}$. Чтобы получить нормируемое решение с убывающей при $\xi \rightarrow \infty$ асимптотикой, надо наложить условие $\beta - (|m| + 1)/2 = n_\rho \geq 0$ – целое. При этом уровни энергии даются формулой (ср. (9.12))

$$E = \hbar\omega_B \left(n_\rho + \frac{|m| + m + 1}{2} + \sigma_z \right) + \frac{p_z^2}{2M}. \quad (9.14)$$

Здесь обсуждавшееся выше вырождение выглядит как независимость от m при $m < 0$ и как независимость от m при фиксированной величине $n_\rho + m$ и при $m > 0$.

9.2.4. Движение спина в магнитном поле

Уравнение движения спина электрона в магнитном поле (с учётом перестановочных соотношений (9.1)) имеет вид

$$i\hbar \frac{d\vec{s}}{dt} = [\vec{s}, \hat{H}] \equiv -i\vec{\mu}_s \times \vec{B} = -2i\mu_B \vec{s} \times \vec{B}$$

Вспомним теперь уравнение для скорости электрона в однородном магнитном поле $d\vec{v}/dt = (e/mc)\vec{v} \times \vec{B}$, решение которого хорошо известно. Как мы видим, уравнение для спина выглядит точно так же. Поэтому оно имеет такое же решение: как вектор скорости, так и вектор спина электрона прецессируют вокруг направления поля \vec{B} с (циклотронной) частотой (9.12). Поэтому проекция спина на направление \vec{v} остается неизменной. Учет малого отличия величины g_e от 1 приводит к небольшому рассогласованию этих скоростей. Если в начале спин был параллелен импульсу, то после одного оборота их направления станут немного различаться, и совпадут только через $N \approx 1/(g_e - 2)$ оборотов. Измерение этого числа оборотов позволяет измерить величину $g_e - 2$ с очень высокой точностью.

Если движение электрона квазиклассично, усреднение уравнения движения для спина по волновому пакету дает для средних значений $d\vec{s}/dt = (e/mc)\vec{s} \times \vec{B}$. Поскольку намагниченность вещества M определяется спинами его электронов, то отсюда следует уравнение для намагниченности

(уравнение Ландау – Лифшица)

$$\frac{d\vec{M}}{dt} = \frac{e}{mc} [\vec{M} \times \vec{B}] \equiv [\vec{\omega}_B \times \vec{M}].$$

9.3. Задачи

Ниже \vec{n} – единичный вектор, $\vec{n}^2 = 1$.

1. Найти оператор проекции спина на ось \vec{n} (угол между \vec{n} и осью z равен θ).
2. В состоянии, где собственное значение \hat{s}_z есть $1/2$, найти вероятности того, что проекция спина на ось \vec{n} есть $+1/2$ и $-1/2$. Найти $|\chi\rangle$, для которой $s_x|\chi\rangle = |\chi\rangle/2$.
3. Получите соотношение (9.5). Найти собственные значения операторов $a + \vec{b}\vec{\sigma}$, $f(a + \vec{b}\vec{\sigma})$.
4. Показать, что $e^{i\vec{\sigma}\vec{n}\theta} = \cos \theta + i\vec{\sigma}\vec{n} \sin \theta$.
5. Найти $(\vec{\sigma}\vec{a})(\vec{\sigma}\vec{b})$; $(\vec{\sigma}\vec{a})^n$; $\exp(i\vec{\sigma}\vec{a})$.
6. Найти $U^{-1}(\phi)\sigma_m U(\phi)$, где $U(\phi) = e^{i\sigma_z\phi/2}$. Убедитесь, что $U(\phi)$ – оператор вращения на угол ϕ вокруг оси y .
7. Пусть $\chi = e^{i\gamma} \begin{pmatrix} \cos \alpha \\ e^{i\beta} \sin \alpha \end{pmatrix}$. Найти такую ось z' , чтобы было $s_{z'}\chi = (1/2)\chi$.
8. Найти относительные интенсивности расщеплённых пучков нейтронов в опыте типа Штерна–Герлаха, если поляризованные вдоль оси x нейтроны движутся вдоль оси z , а магнитное поле направлено в плоскости xy под углом 45° к оси x .
9. Найти компоненты вектора спина в матричной форме, подобные (9.2) для $s = 1$.
10. Докажите, что $P_+ = (1 + \vec{\sigma}\vec{n})/2$ – проекционный оператор. Найти собственный вектор этого состояния (состояния, на которое осуществляется проектирование).
11. Найти собственные значения оператора $(\vec{s}_1\vec{s}_2)$.
12. Электроны, поляризованные вдоль оси z , движутся вдоль этой оси. Они проходят последовательно фильтры, пропускающие частицы, поляризованные вдоль оси x (вверх), и под углом θ к оси x – в плоскости xy . Найти долю прошедших частиц.
13. Пучок нейтронов (спин $1/2$), поляризованных вдоль оси x , влетает в однородное магнитное поле, направленное вдоль оси z . Найти средние значения $\langle s_x \rangle$ и $\langle s_x^2 \rangle$.

14. Пучок частиц, поляризованных вдоль оси z , движется вдоль этой оси. Он проходит последовательно фильтры, пропускающие частицы, поляризованные вдоль оси x (вверх), и под углом θ к оси x - в плоскости xy . Найти долю прошедших частиц.
15. Пучок нейтронов, движущихся вдоль оси x со скоростью v и поляризованных по направлению движения, проходит область длиной L с однородным магнитным полем B , направленным по оси z . После этого пучок проходит через фильтр, пропускающий лишь нейтроны, поляризованные под углом θ к оси x в плоскости xz . Найти долю нейтронов, проходящих через фильтр.
16. Пучок нейтронов движется по оси x и попадает при $x = 0$ в область однородного магнитного поля, направленного по оси z . Найти коэффициент отражения для нейтронов, поляризованных по оси z вверх или вниз. Найти вероятность переверота спина при отражении для нейтронов, поляризованных по оси x .
17. Найти плотность тока вероятности для электрона в магнитном поле.
18. Найти уровни энергии электрона в поле $U = \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2)$ и в однородном магнитном поле B , направленном по оси z .
19. Описать движение спина в магнитном поле

$$\vec{B}(t) = \vec{e}_x B \cos \omega t + \vec{e}_y B \sin \omega t + \vec{e}_z B_0.$$

20. Показать, что

$$\left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right)^2 - 2m \frac{e\hbar}{2mc} \vec{\sigma} \vec{B} = \left(\vec{\sigma} \left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right) \right)^2.$$

21. Уровни энергии частицы 0 и E . Как они сдвинутся под действием возмущения, которое можно записать в виде матрицы по этим состояниям: $V = a\sigma_y + b\sigma_x$. Рассмотрите переход к случаю с вырождением, $E = 0$. (Другие уровни расположены далеко).

Глава 10

СЛОЖЕНИЕ МОМЕНТОВ

Начиная с этой главы буквой j обозначаются и орбитальный момент ℓ и спин s . Для соответствующих операторов \hat{j}_i справедливы перестановочные соотношения (7.2), но связь с координатами типа (7.15), вообще говоря, отсутствует.

Для определённости будем считать всегда $j_1 \geq j_2$.

10.1. Сложение моментов

◇ Рассмотрим сначала пример, в котором должна быть решена задача сложения моментов. — *Электроны в атоме*. Эта система в целом обладает сферической симметрией, и полный момент импульса системы сохраняется. В первом приближении каждый электрон движется в центрально-симметричном самосогласованном поле ядра и остальных электронов, определены моменты каждого электрона. При учёте различия взаимодействия между электронами от взаимодействия с их усреднённым распределением, эта сферическая симметрия для отдельных электронов нарушается, т.е. моменты отдельных электронов не сохраняются, но сохраняется суммарный момент всех электронов. Однако, пока это взаимодействие между электронами остаётся слабым, "память" о моментах отдельных электронов должна сохраняться в полном описании.

◆ Итак, пусть рассматриваемую сферически симметричную систему можно разбить на две подсистемы; каждая из подсистем сама по себе обладает сферической симметрией, а их взаимодействие нарушает эти отдельные симметрии. Сферические симметрии подсистем означают в частности, что их состояния характеризуются значениями моментов j_1 и j_2 . Нарушающее симметрию взаимодействие часто зависит от относительной ориентации этих моментов так, что соответствующее возмуще-

ние можно записать в виде $\hat{V} = 2A(\vec{j}_1\vec{j}_2)$

Действуя по теории возмущений, нужно найти собственные значения оператора \hat{V} и построить его собственные состояния из собственных состояний подсистем. Для этого перепишем оператор V через оператор суммарного момента системы $\vec{j} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$

$$\hat{V} = A \left(\vec{j}^2 - \vec{j}_1^2 - \vec{j}_2^2 \right), \quad (\vec{j} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2). \quad (10.1)$$

Из перестановочных соотношений (7.2), (7.5) для операторов \hat{j}_{1i} и \hat{j}_{2i} получаются точно такие же соотношения для суммарного момента \hat{j}_i . Собственные значения оператора \hat{j}^2 определяются стандартным образом (7.10). Поэтому все выводы, следующие из алгебры операторов, справедливы и в этом случае. В частности, собственные значения оператора (10.1) можно записать в виде $A[j(j+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)]$.

Таким образом, необходимо по известным исходным состояниям $|j_1, m_1\rangle$, $|j_2, m_2\rangle$ построить собственные состояния оператора полного момента и найти возможные собственные значения этого оператора.

Состояние такой системы можно описать двумя разными способами:

- Набором собственных функций $\Psi_{m_1, m_2} = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$ коммутирующих операторов $\hat{j}_1^2, \hat{j}_{1z}, \hat{j}_2^2, \hat{j}_{2z}$ с собственными значениями $j_1(j_1+1), m_1, j_2(j_2+1), m_2$:
- Набором собственных функций $\Phi_{jm} = |j, m; j_1, j_2\rangle$ коммутирующих операторов $\hat{j}^2, \hat{j}_z, \hat{j}_1^2, \hat{j}_2^2$ с собственными значениями $j(j+1), m, j_1(j_1+1), j_2(j_2+1)$:

(Функции Ψ и Φ следовало бы снабдить также индексами j_1 и j_2 , но эти значения фиксированы, и они не выписываются явно.)

♦ *Проблемой сложения моментов* называют следующий набор задач:

1. Какие значения m возможны при заданных m_1 и m_2 ?
2. Какие значения j возможны при данных j_1 и j_2 ?
3. Каковы чётности суммарных состояний?
4. Ясно, что любая функция Φ может быть выражена через линейные комбинации функций Ψ , и наоборот:

$$\begin{aligned} |j_1, j_2; j, m\rangle &= \sum_{m_1, m_2} C_{m_1 m_2}^{jm} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle; \\ |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle &= \sum_{j, m} \tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm} |j, m; j_1, j_2\rangle. \end{aligned} \quad (10.2)$$

Как найти коэффициенты C и \tilde{C} (их называют коэффициентами Клебша-Гордана)?

◆ Отметим, что $\tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm} = \langle \Phi_{jm} | \Psi_{m_1 m_2} \rangle$ и $C_{m_1 m_2}^{jm} = \langle \Psi_{m_1, m_2} | \Phi_{jm} \rangle = (\tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm})^*$. Поэтому если выбрать коэффициенты C вещественными, то

$$C_{m_1 m_2}^{jm} = \tilde{C}_{m_1 m_2}^{jm}. \quad (10.3)$$

Далее мы сначала изложим результаты, а затем опишем способ отыскания коэффициентов Клебша-Гордана и убедимся в полноте полученной конструкции. Это и составит полное решение задачи.

Ответы на первые вопросы составляют содержание "**векторной модели**" сложения моментов: *Моменты – это стрелочки длиной j_1 и j_2 , которые могут быть направлены по-разному, и их суммарные величины пробегают все возможные значения.* Иными словами, ответы на первые два вопроса (10.4) таковы же, как и в классической механике. Ответы на остальные вопросы являются специфически квантовыми.

1. Так как $\hat{j}_z = \hat{j}_{1z} + \hat{j}_{2z}$, то

$$m = m_1 + m_2. \quad (10.4a)$$

2. Величина j принимает значения

$$j = j_1 + j_2, \quad j_1 + j_2 - 1, \quad j_1 + j_2 - 2, \quad |j_1 - j_2|. \quad (10.4b)$$

3. Чётность состояний суммарного момента \mathcal{P} не определяется величиной j , но во всех случаях $\mathcal{P} = \mathcal{P}_1 \cdot \mathcal{P}_2$, где \mathcal{P}_i – чётности состояний $|j_i, m_i\rangle$. Если один из входящих в сумму моментов – спиновый, то понятие чётности для него не определено (*спин – внутренняя степень свободы*). Можно определить понятие внутренней чётности спинового состояния, и она сохраняется в сумме моментов.

∇ Чтобы убедиться, что в ответах (10.4) учтены все состояния, пересчитаем их в обоих описаниях системы.

При описании через состояния складываемых моментов число различных состояний есть $N = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. При втором описании для каждого j имеется $2j + 1$ различных значений $m = -j, -j + 1, \dots, j$. Число таких функций есть $\sum (2j + 1)$, где сумма берется по всем допустимым при данных j_1 и j_2 значениям j :

$$\sum_{|j_1 - j_2|}^{j_1 + j_2} (2j + 1) = \sum_0^{j_1 + j_2} (2j + 1) - \sum_0^{|j_1 - j_2| - 1} (2j + 1) =$$

$$(j_1 + j_2 + 1)^2 - |j_1 - j_2|^2 = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1).$$

Как и следовало ожидать, это число совпадает с N .

□ Получим теперь (10.4b) и найдем коэффициенты C , приняв для определенности $j_1 \geq j_2 \geq 1$. Основная идея построения – для каждого допустимого значения суммарного момента j должны реализовываться (при различных проекциях моментов j_1 и j_2) все возможные значения проекций этого момента.

◆ Теперь мы построим векторы состояний $|J, J_z = m\rangle$, разложив их по функциям исходного базиса $|J_1, J_{1z} = m_1\rangle |J_2, J_{2z} = m_2\rangle$. Коэффициенты этого разложения и есть коэффициенты Клебша–Гордана.

◇ Рассмотрим сначала простейший пример сложения двух спиновых моментов, $J_1 = J_2 = 1/2$. Суммарные значения момента импульса такой системы J могут составлять 1 ("спины параллельны") и 0 ("спины антипараллельны").

Набор спиновых состояний такой системы состоит из векторов,

$$\begin{aligned} |I\rangle &\equiv |1/2, +1/2\rangle |1/2, +1/2\rangle, \\ |II\rangle &\equiv |1/2, +1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle, \quad |III\rangle \equiv |1/2, -1/2\rangle |1/2, +1/2\rangle, \\ |IV\rangle &\equiv |1/2, -1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle, . \end{aligned}$$

Вектор $|I\rangle$ – единственный вектор, который отвечает проекции полного момента на ось z , равной 1, в нашем случае это может реализовываться только при $J = 1$. Поэтому можно принять $|J = 1, m = 1\rangle = |I\rangle$.

Векторы $|II\rangle$ и $|III\rangle$ отвечают проекции полного момента на ось z , равной 0, в нашем случае это может реализовываться и при $J = 1$ и при $J = 0$. Поэтому состояния $|J = 1, m = 0\rangle$ и $|J = 0, m = 0\rangle$ должны быть *суперпозициями* состояний $|II\rangle$ и $|III\rangle$.

Наконец, вектор $|IV\rangle$ – единственный вектор, который отвечает проекции полного момента на ось z , равной -1, в нашем случае это может реализовываться только при $J = 1$. Поэтому $|J = 1, m = -1\rangle \propto |IV\rangle$ (здесь может появиться какой-нибудь фазовый множитель).

Чтобы построить состояния $|J = 1, m = 0\rangle$ и $|J = 0, m = 0\rangle$, стартуя от выбранного вида $|I\rangle = |J = 1, m = 1\rangle$, подействуем на $|I\rangle$ понижающим оператором $\hat{j}_- \equiv \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$. С учётом (7.12), $\hat{j}_- |1, 1\rangle = 2|1, 0\rangle$ и $\hat{j}_- |1/2, 1/2\rangle = \sqrt{2}|1, 0\rangle$. Поэтому

$$\begin{aligned} \hat{j}_- |1, 1\rangle &= 2|1, 0\rangle \equiv \left(\hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-} \right) |1/2, +1/2\rangle |1/2, +1/2\rangle \\ &\quad \sqrt{2} (|1/2, -1/2\rangle |1/2, +1/2\rangle + |1/2, +1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle) \\ &\Rightarrow |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|II\rangle + |III\rangle). \end{aligned}$$

Состояние $|0, 0\rangle$ строится из тех же состояний $|II\rangle$ и $|III\rangle$ и оно ортогонально к состоянию $|1, 0\rangle$. Поэтому вектор этого состояния должен иметь вид $|0, 0\rangle = (|II\rangle - |III\rangle)/\sqrt{2}$ (выбор общей фазы – наш произвол). Коэффициенты $\pm 1/\sqrt{2}$ – это коэффициенты Клебша – Гордана в нашем случае.

Легко убедиться, что подобное же действие оператора $\hat{j}_- \equiv \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$ на состояние $|0, 0\rangle$ даёт ноль, а действие этого оператора на состояние $|1, 0\rangle$ даёт $|1, -1\rangle = |IV\rangle$.

◇ Процедура общего случая воспроизводит вышеизложенную.

∇ В силу (10.4а), максимальное значение $m = j_1 + j_2$. Поэтому и максимальное значение $j = j_1 + j_2$. Это состояние получается единственным образом. Поэтому

$$|j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle = |j_1, m_1 = j_1\rangle |j_2, m_2 = j_2\rangle.$$

∇ Под действием оператора $\hat{j}_- \equiv \hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}$ это состояние переходит в $|j = j_1 + j_2, m = j_1 + j_2 - 1\rangle$. С учетом (7.12)

$$\begin{aligned} \hat{j}_- |j_1 + j_2, m = j_1 + j_2\rangle &= \sqrt{2(j_1 + j_2)} \cdot |j_1 + j_2, m = j_1 + j_2 - 1\rangle \equiv \\ &(\hat{j}_{1-} + \hat{j}_{2-}) |j_1, m_1 = j_1\rangle |j_2, m_2 = j_2\rangle = \\ &\sqrt{2j_1} \cdot |j_1, m_1 = j_1 - 1\rangle |j_2, m_2 = j_2\rangle + \sqrt{2j_2} \cdot |j_1, m_1 = j_1\rangle |j_2, m_2 = j_2 - 1\rangle. \end{aligned}$$

(Далее мы опускаем указания $j = \dots, m_i = \dots$ в обозначениях векторов состояний.)

Отсюда следует:

$$|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \cdot |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \cdot |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle. \quad (10.5a)$$

Из двух векторов состояний, стоящих в правой части этого равенства можно сформировать другой вектор состояния, ортогональный к (10.5а). Для такого состояния снова $m = j_1 + j_2 - 1$, но для него эта величина – наибольшее значение m . Поэтому оно соответствует $j = j_1 + j_2 - 1$, т.е.

$$|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}} \cdot |j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle - \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}} \cdot |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle. \quad (10.5b)$$

∇ Дальнейшее действие оператора \hat{j}_- на состояния (10.5а) и (10.5b) дает состояния $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 2\rangle$ и $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 2\rangle$. Эти два

новых состояния - суперпозиции базисных состояний

$$|j_1, j_1 - 2\rangle|j_2, j_2\rangle, \quad |j_1, j_1 - 1\rangle|j_2, j_2 - 1\rangle, \quad |j_1, j_1\rangle|j_2, j_2 - 2\rangle.$$

Сформированное из этих базисных состояний третье состояние, ортогональное к двум первым, есть $|j_1 + j_2 - 2, j_1 + j_2 - 2\rangle$.

∇ Этот процесс появления новых значений j продолжается до тех пор, пока с уменьшением m увеличивается число различных базисных функций $|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2 = m - m_1\rangle$, т.е. до $m = j_1 - j_2$ (10.4b).

Итак, задача в принципе решена. Существуют и другие методы её решения. Один из них указывает задача 5 к этой главе. Кроме того, коэффициенты Клебша–Гордана можно найти в многочисленных таблицах.

10.2. Матричные элементы скаляров и векторов

Ниже рассматриваются матричные элементы операторов по состояниям $|\alpha j m\rangle$, где квантовые числа α описывают не зависящие от момента характеристики. Интересуясь только свойствами операторов по отношению к вращениям, мы не выписываем ниже значок α .

10.2.1. Правила отбора

Мы рассмотрим сначала *правила отбора* для различных операторов, перечисляющие те состояния, между которыми матричные элементы этих операторов заведомо равны нулю. Это особенно важно в наше время широкого распространения компьютерных вычислений, когда бездумное вычисление какого-нибудь матричного элемента может дать очень малую величину, и без учёта правил отбора пришлось бы думать, есть ли эта малость просто неточно вычисленный нуль (следствие ошибок округления), или это действительно очень малая конечная величина, которую следует учитывать в детальном анализе.

■ **Скалярный оператор.** *Скалярным* называется оператор \hat{P} , вид которого не меняется при вращениях системы координат. Такой оператор \hat{P} коммутирует с оператором момента импульса системы \hat{j} :

$$[\hat{j}_i, \hat{P}] = 0 \Rightarrow [\hat{j}_z, \hat{P}] = 0, \quad [\hat{j}^2, \hat{P}] = 0.$$

Пусть $|jm\rangle$ - собственный вектор операторов \hat{j}^2 и \hat{j}_z с собственными значениями $j(j+1)$ и m соответственно, Из соотношения

$$[\hat{j}_z, \hat{P}] = 0 \Rightarrow \langle j'm' | \hat{j}_z \hat{P} - \hat{P} \hat{j}_z | jm \rangle = (m' - m) \cdot \langle j'm' | \hat{P} | jm \rangle = 0$$

следует, что матричный элемент $\langle j'm' | \hat{P} | jm \rangle$ может отличаться от нуля лишь при $m' = m$. Точно так же, из соотношения $[\hat{j}^2, \hat{P}] = 0 \Rightarrow \langle j'm' | \hat{j}^2 \hat{P} - \hat{P} \hat{j}^2 | jm \rangle = 0$ следует, что этот же матричный элемент может быть отличен от нуля лишь при $j' = j$. Наконец, рассматривая матричные элементы от операторных равенств типа $\hat{j}_- \hat{P} \hat{j}_+ = \hat{P} \hat{j}_- \hat{j}_+$, получим, что обсуждаемый матричный элемент вообще не зависит от m , т.е.

$$\langle j'm' | \hat{P} | jm \rangle = a(j) \cdot \delta_{jj'} \cdot \delta_{mm'}. \quad (10.6)$$

Этого и следовало ожидать, т.к. матричный элемент скалярного оператора не может зависеть от направления момента импульса.

■ **Векторный оператор.** В какой-нибудь прямоугольной системе координат *векторный* оператор \hat{V} записывается в виде набора трёх операторов $\vec{V}_x, \vec{V}_y, \vec{V}_z$; при вращении системы этот набор превращается в набор $(\vec{V}_{x'}, \vec{V}_{y'}, \vec{V}_{z'})$, компоненты которого известным образом выражаются через коэффициенты первого набора.

Соотношения между компонентами вектора $\vec{n} = \vec{r}/r$ и сферическими функциями $Y_{\ell=1,m}(\theta, \phi)$ (7.18) вместе с правилами сложения моментов показывают, что произведение $n_z |jm\rangle$ может быть представлено в виде суперпозиции функций $\Phi_{j_s m_s}$ с $m_s = m$ и $j_s = j, j \pm 1$. Поэтому матричный элемент $\langle j'm' | n_z | jm \rangle$ может отличаться от нуля только при $m' = m, j' = j, j \pm 1$. Аналогично, для $\langle j'm' | n_{\pm} | jm \rangle$ получаются правила отбора $m' = m \pm 1$ и те же правила отбора для j . Существенным для доказательства был не конкретный вид оператора \vec{n} , а его векторный характер. Поэтому и для любого *векторного оператора* \hat{V} справедливы *правила отбора*:

$$\begin{aligned} \langle j'm' | \hat{V}_i | jm \rangle &\neq 0 \text{ лишь при } j' = j, j \pm 1, \\ \langle j'm' | \hat{V}_z | jm \rangle &\neq 0 \text{ лишь при } m' = m, \\ \langle j'm' | \hat{V}_a | jm \rangle &\neq 0 \text{ лишь при } m' = m \pm 1 \quad (V_a = V_x, V_y), \\ \langle 00 | V_i | 00 \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (10.7)$$

• *Правила отбора по чётности.* Напомним, что есть два типа векторов. Компоненты обычных (полярных) векторов V меняют знак при

отражении координат (смещение, импульс, электрический дипольный момент, электрическое поле). Компоненты аксиального вектора A не меняются при отражении (вектор угловой скорости, магнитное поле, магнитный дипольный момент,...). Соответственно, матричные элементы $\langle n|V|m\rangle$ отличны от нуля только при различных чётностях состояний $|n\rangle$ и $|m\rangle$. Точно так же, матричные элементы $\langle n|A|m\rangle$ отличны от нуля только при совпадающих чётностях состояний $|n\rangle$ и $|m\rangle$.

10.2.2. Усреднение векторного оператора.

Используя соотношения (7.2), можно убедиться, что

$$[\hat{j}^2, \hat{V}_i] = -ie_{ijk}(\hat{j}_j \hat{V}_k + \hat{V}_k \hat{j}_j); \quad (10.8)$$

$$[\hat{j}^2, [\hat{j}^2, \hat{V}]] = 2(\hat{j}^2 \hat{V} + \hat{V} \hat{j}^2) - 4\hat{j}(\hat{j} \hat{V}).$$

Взяв от этого соотношения матричный элемент по состояниям¹ $|jm\rangle$, $|jm'\rangle$, т.е. записав $\langle j, m | [\hat{j}^2, [\hat{j}^2, \hat{V}]] | jm'\rangle = 0$, получим формулу усреднения

$$\langle jm' | \hat{V}_i | jm \rangle = \langle jm' | \hat{j}_i | jm \rangle \frac{\langle jm | (\hat{j} \hat{V}) | jm \rangle}{j(j+1)}. \quad (10.9)$$

Это означает, что усредненный вектор V направлен по усредненному вектору j . (Напомним, что матричный элемент *скаляра* $\langle jm | (\hat{j} \hat{V}) | jm \rangle$ не зависит от проекции m полного момента на ось z .)

10.2.3. Сдвиг уровней в магнитном поле (*эффект Зеемана*)

В атомных системах нередко возникают ситуации, когда спины и орбитальные моменты отдельных электронов складываются в полный спин $\vec{S} = \sum \vec{s}_i$ и полный орбитальный момент этих электронов $\vec{L} = \sum \vec{l}_i$, а уж затем они складываются в полный момент атома $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ (LS – связь, см. ниже). В отсутствие электрического и магнитного полей, состояния такой системы вырождены по проекциям \vec{J} на какую-нибудь ось, т.е. $2J + 1$ –кратно.

¹ Но не матричный элемент перехода между состояниями $|j, m\rangle$ и $|j', m'\rangle$ с $j' \neq j$.

Когда такая система помещается в магнитное поле $\vec{B} = (0, 0, B)$, это вырождение снимается, уровни энергии смещаются в соответствии с (9.11). Соответственно сдвигаются и спектральные линии.

Сдвиг энергии уровня с проекцией момента на направление поля, равной M , описывается соотношением

$$\Delta E = \mu_B B \langle JM | V | JM \rangle \quad (\vec{V} = \vec{L} + 2\vec{S}).$$

Входящее сюда среднее вычисляется с помощью (10.9):

$$\langle JM | V_z | JM \rangle = \frac{\langle JM | J_z | M, J \rangle \langle JM | (\vec{J}\vec{V}) | JM \rangle}{J(J+1)};$$

Здесь $(\vec{J}\vec{V}) = \vec{J}^2 + (\vec{J}\vec{S})$. Для вычисления последнего скалярного произведения вспомним, что $\vec{L}^2 \equiv (\vec{J} - \vec{S})^2 \equiv \vec{J}^2 + \vec{S}^2 - 2(\vec{J}\vec{S})$. Окончательно

$$(\vec{J}\vec{V}) = \vec{J}^2 + \frac{\vec{J}^2 - \vec{L}^2 + \vec{S}^2}{2}.$$

Вычисляя среднее от этой суммы операторов, найдем сдвиг уровней

$$\Delta E = g\mu_B MB, \quad g = \frac{3J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (10.10)$$

Коэффициент g называют *множителем Ланде*.

10.3. Задачи

1. Покажите: при сложении двух одинаковых моментов $j_1 = j_2$ состояния с $j = 2j_1, 2j_1 - 2, 2j_1 - 4, \dots$ симметричны по перестановке m_1, m_2 , а состояния с $j = 2j_1 - 1, 2j_1 - 3, \dots$ — антисимметричны.
2. Найти собственные функции при сложении моментов
 - а) $j_1 = 1$ и $j_2 = 2$, б) $j_1 = 1$ и $j_2 = 1$, в) $j_1 = 1$ и $j_2 = 1/2$,
 - д) $j_1 = 1/2$ и $j_2 = 1/2$, е) $j_1 = 3/2$ и $j_2 = 2$.
3. Найти правила отбора для матричных элементов дипольного $\sum e x_i$ и квадрупольного $\sum e(x_i x_j - r^2 \delta_{ij}/3)$ моментов.
4. Показать что оператор $P = (1 + \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2)/2$ является оператором спинового обмена, т.е. его собственные значения в состояниях с полным спином 0 и 1 есть ± 1 . (Индексы 1, 2 относятся к первой и второй частице со спином $1/2$).

5. Пусть $\hat{j} = \hat{j}_1 + \hat{j}_2$. Покажите, что оператор

$$\hat{\mathcal{P}}_{j_0} = \prod_{j_i=|j_1-j_2|, j_i \neq j_0}^{j_1+j_2} \frac{\hat{j}^2 - j_i(j_i + 1)}{j_0(j_0 + 1) - j_i(j_i + 1)}.$$

— оператор проектирования на состояние с собственным значением $j = j_0$.

6. Найти среднее значение магнитного момента электрона в состоянии $p_{1/2}$, используя: а) результаты задачи 2; б) (10.9).
7. Найти и сравнить средние $\langle A|\hat{\mu}_z|A\rangle$ и $\langle B|\hat{\mu}_z|B\rangle$ для состояний $|A\rangle = |JJ_z\ell s\rangle$ и $|B\rangle = |\ell, \ell_z, s, s_z\rangle$. Здесь $\hat{\mu} = \mu_B(\hat{\ell} + 2\hat{s})$ — оператор магнитного момента ($\mu_B = e\hbar/2mc$).
8. Две частицы с моментами $J_1 = 1$ и $J_2 = 4$ взаимодействуют с потенциалом $U = C \hat{J}_1 \hat{J}_2$. Найти спектр стационарных состояний. Определить кратности вырождения. Найти среднее значение $\hat{\mu}_z = \beta(g_1\hat{J}_{1z} + g_2\hat{J}_{2z})$ при $J = 5$.
9. Получите соотношения (10.8).
10. Показать, что коммутируют операторы \hat{H} и \hat{S}^2 , где

$$\hat{H} = -J \sum_{n,\delta} \vec{S}_n \vec{S}_{n+\delta} - 2\mu_B \cdot S_z, \quad \vec{S} = \sum_n \vec{S}_n.$$

11. Для системы трех частиц со спином $1/2$

$$\hat{H} = \lambda(\vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_2 + \vec{\sigma}_1 \vec{\sigma}_3 + \vec{\sigma}_2 \vec{\sigma}_3).$$

найти уровни энергии и кратности вырождения для состояний с $S = 3/2$ и с $S = 1/2$. Найти собственные состояния $|S^2, S_z\rangle$.

12. Найти магнитное поле, действующее на ядро со стороны электрона в состоянии $|n, \ell, \ell_z, j_z\rangle$.
13. Найти сдвиги уровней в магнитном поле в состояниях
 а) $|J, M, L, S\rangle$, б) $|L, M_L, S, M_S\rangle$,
 с) $|J, M, J_1, J_2\rangle$. В этом случае считаются известными множители Ланде g_1 и g_2 для состояний $|J_1, M_1\rangle$ и $|J_2, M_2\rangle$.
14. Две частицы с моментами $J_1 = 3$ и $J_2 = 2$ взаимодействуют по закону $V = A \vec{J}_1 \vec{J}_2$. Найти уровни энергии, кратность вырождения и среднее значение оператора магнитного момента в этих состояниях.
15. Получите соотношения (10.8).

Глава 11

ТОЖДЕСТВЕННОСТЬ ЧАСТИЦ

В этой главе координатой q частицы называется набор из её пространственных \vec{r} и спиновых s_z координат.

11.1. Тожественность частиц

В классической механике одинаковые частицы считаются различными (как будто у каждой на боку можно поставить метку — номер). В квантовой механике это не так. В силу принципа неопределенности, понятие о траектории электрона теряет точный смысл, и через мгновение после того, как мы заметили два электрона, уже невозможно сказать, где первый, где — второй (разумеется, с точностью до ограничения скорости скоростью света). Принцип квантовой неразличимости частиц гласит:

$$\boxed{\text{Частицы одного сорта различить невозможно.}} \quad (11.1)$$

Поэтому волновая функция пары частиц $\psi(q_1, q_2)$ при замене q_1 на q_2 определяет то же состояние, т.е. $\psi(q_2, q_1) = e^{i\alpha}\psi(q_1, q_2)$. Иными словами, оператор перестановки частиц \hat{P}_{12} , определяемый соотношением $\hat{P}_{12}\psi(q_1, q_2) = \psi(q_2, q_1)$, имеет собственные значения $e^{i\alpha}$. Но по определению $\hat{P}_{12}[\hat{P}_{12}\psi(q_1, q_2)] = \psi(q_1, q_2)$. Поэтому $e^{2i\alpha} = 1$, т.е. $e^{i\alpha} = \pm 1$, или

$$\psi(q_1, q_2) = \pm\psi(q_2, q_1). \quad (11.2)$$

Итак, волновая функция пары тождественных частиц либо симметрична, либо антисимметрична при их перестановке. (Разумеется, в описание входят и пространственные и спиновые переменные).

• Если волновая функция *симметрична* при перестановках, говорят, что частицы подчиняются *статистике Бозе – Эйнштейна*, их называют **бозонами**.

• Если волновая функция *антисимметрична* при перестановках, говорят, что частицы подчиняются *статистике Ферми – Дирака*, их называют **фермионами**.

□ В. Паули показал, что все частицы с полуцелым спином (электроны, протоны, кварки, ядра трития,...) – фермионы, а все частицы с целым спином (фотоны, α -частицы, дейтоны,...) – бозоны.

Волновая функция пары не взаимодействующих нетождественных частиц $\psi(q_1, q_2) = \psi_1(q_1)\psi_2(q_2)$. Если частицы тождественны, то в силу (11.2)

$$\psi(q_1, q_2) = \frac{\psi_1(q_1)\psi_2(q_2) \pm \psi_1(q_2)\psi_2(q_1)}{\sqrt{2}}; \quad (+) - \text{бозоны}; \quad (-) - \text{фермионы}. \quad (11.3a)$$

Соответственно, для N тождественных фермионов

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(q_1) & \psi_2(q_1) & \dots & \psi_N(q_1) \\ \psi_1(q_2) & \psi_2(q_2) & \dots & \psi_N(q_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_1(q_N) & \psi_2(q_N) & \dots & \psi_N(q_N) \end{vmatrix}. \quad (11.3b)$$

В частности, если среди волновых функций фермионов $\psi_i(q)$ есть две одинаковых, то $\Psi = 0$, т.е. имеет место **принцип Паули**:

В системе одинаковых фермионов не могут одновременно находиться в одном состоянии две (или более) частицы.

(11.3c)

В отсутствие магнитного поля волновую функцию можно представить как произведение координатной и спиновой волновой функций: $\psi(q) = \psi(\vec{r})\chi(s_z)$. Если энергия системы не зависит от s_z (т.е. имеется вырождение по s_z), то можно образовать новый базис – суперпозицию волновых функций (11.3b). Целесообразно выбрать такие суперпозиции, чтобы при данных $\psi_i(\vec{r})$ спиновые волновые функции образовывали либо симметричные, либо антисимметричные комбинации. Тогда полная симметрия волновой функции (11.3b) сохранится, если использовать комбинации (для пары фермионов):

$$\frac{[\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) \pm \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1)]}{\sqrt{2}} \cdot \frac{[\chi_1(s_{z1})\chi_2(s_{z2}) \mp \chi_1(s_{z2})\chi_2(s_{z1})]}{\sqrt{2}}.$$

Для пары частиц со спином $1/2$ спиновая волновая функция симметрична в состоянии, когда полный спин равен 1, и волновая функция антисимметрична в состоянии, когда полный спин равен 0. И наоборот, если полный спин состояния равен 1, пространственная волновая функция

антисимметрична. Если же полный спин состояния равен 0, пространственная волновая функция симметрична.

Для N тождественных бозонов волновая функция образуется по тому же типу, но - в отличие от детерминанта (11.3b), куда отдельные слагаемые входят с разными знаками, - для бозонов все слагаемые суммы входят со знаком "плюс". Так, для пары бозонов, находящихся в одинаковом квантовом состоянии $\psi(q_1, q_2) = \psi_1(q_1)\psi_1(q_2)$. (Разумеется, подобные совпадения меняют нормировочный коэффициент.)

11.1.1. Обменное взаимодействие

Если учесть взаимодействие, то — в силу тождественности частиц — энергия системы зависит от суммарного спина (даже в отсутствие прямого взаимодействия между спинами). Это позволяет говорить о специфически квантовом — **обменном** взаимодействии тождественных частиц.

Это проще всего продемонстрировать на примере. Рассмотрим энергию пары электронов, считая их взаимодействие $U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ возмущением. Состояниям пары электронов с полным спином $s = 0$ или 1 отвечают пространственные волновые функции

$$\Psi(1, 2) = \frac{\psi_1(r_1)\psi_2(r_2) \pm \psi_1(r_2)\psi_2(r_1)}{\sqrt{2}}. \quad (11.4)$$

(Знаки + и - соответствуют суммарным спинам 0 и 1 соответственно.)

Средняя энергия взаимодействия $\langle U \rangle = \int \Psi^* U(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \Psi d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2$. Подставим в этот интеграл (11.4) и найдем:

$$\langle U \rangle = \begin{cases} A + J & (s = 0) \\ A - J & (s = 1) \end{cases} \quad (11.5)$$

$$A = \int \int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 U_{12} |\psi_1(r_1)|^2 |\psi_2(r_2)|^2,$$

$$J = \int \int d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 U_{12} \psi_1(r_1) \psi_2^*(r_1) \psi_2(r_2) \psi_1^*(r_2).$$

Чтобы получить другую форму этого равенства, запишем выражение для квадрата вектора $\hat{\vec{s}}$, равного сумме векторов спина двух электронов $\hat{\vec{s}}_1 + \hat{\vec{s}}_2$, $\hat{s}^2 = \hat{s}_1^2 + \hat{s}_2^2 + 2\hat{s}_1\hat{s}_2 = 3/2 + 2(\hat{\vec{s}}_1\hat{\vec{s}}_2)$.

В состоянии с полным спином 1 правая часть равна 2, а в состоянии с полным спином 0 правая часть равна 0. Поэтому можно записать

$$\frac{1}{2} + 2\hat{\vec{s}}_1\hat{\vec{s}}_2 = \begin{cases} 1 & \text{при } s = 1, \\ -1 & \text{при } s = 0. \end{cases}$$

Подставляя это равенство в (11.5), найдём удобную для дальнейшего форму этого выражения

$$\langle U \rangle = \tilde{A} - 2J\hat{s}_1\hat{s}_2, \quad \left(\tilde{A} = A - \frac{J}{2} \right). \quad (11.6)$$

Величину J называют *обменным интегралом*. Этот интеграл обычно на $1 \div 2$ порядка меньше кулоновской энергии (только из-за не очень сильного пространственного перекрытия волновых функций) – в отличие от взаимодействий, связанных со спином через его магнитные свойства (последние дают энергии по крайней мере в $\alpha^2 \sim 10^{-4}$ раз меньше атомных).

Именно такое — *обменное* — взаимодействие ответственно за ферромагнетизм кристаллов, которое представляет собой упорядочение спинов (т.е. и магнитных моментов) атомов кристалла. Действительно, соотношение (11.5) показывает, что при $J > 0$ энергетически выгодно, чтобы спины выстраивались параллельно друг другу. В веществе это соответствует ферромагнитному упорядочению. Если $J < 0$, то энергетически выгодно, чтобы соседние спины выстраивались антипараллельно друг другу. В веществе это соответствует антиферромагнитному упорядочению. В анизотропных кристаллах возникают и более сложные структуры. Подробнее ферромагнетизм обсуждается во второй части курса.

Спиновое происхождение ферромагнетизма означает, что гиромагнитное отношение для вещества M/L должно быть вдвое больше своего классического значения. Эйнштейн придумал опыт для проверки этого утверждения. Он состоял в измерении момента импульса первоначально неподвижного диска в результате перемагничивания с периодом, равным периоду крутильных колебаний цилиндра. Такой опыт был впервые выполнен де Гаазом. Дальнейшие повторения подобных опытов подтвердили спиновое происхождение магнетизма.

11.1.2. Понятие о вторичном квантовании

При изучении систем, состоящих из большого числа одинаковых частиц применяют метод *вторичного квантования*. Такой подход особенно продуктивен для описания систем с переменным числом частиц — в физике элементарных частиц и в физике твёрдого тела.

Основные идеи этого подхода были развиты при описании осциллятора. В этой задаче стационарное состояние осциллятора $|n\rangle$ может рассматриваться как состояние с n вибронами, которое получается из основного n -кратным действием оператора рождения \hat{b}^+ на основное со-

стояние $|0\rangle$. Это состояние полностью определяется заданием числа n и общей фазой волновой функции. Ниже мы несколько видоизменяем эту постановку, сопоставляя отдельный гамильтониан каждой частице.

Пусть гамильтониан системы можно представить в виде суммы одночастичных гамильтонианов $\hat{H}^1(a)$, каждый из которых описывает состояния отдельной частицы a , и добавки, описывающей взаимодействие,

$$\hat{H} = \sum_a \hat{H}^1(a) + \hat{V}. \quad (11.7)$$

Перенумеруем собственные состояния одночастичного гамильтониана \hat{H}^1 числами $1, 2, \dots$ (Обычно помещают систему в конечный объём, чтобы использовать и дискретный спектр.)¹ В пренебрежении взаимодействием, состояние системы однозначно определяется набором *чисел заполнения* – чисел частиц, находящихся в каждом из состояний.

Вторичным квантованием называется запись волновой функции в представлении чисел заполнения N_1, N_2, \dots , т.е. в виде таблицы значений этих чисел $|\Phi\rangle \equiv |N_1, N_2, \dots\rangle$.

Переходы между различными состояниями в таком подходе описываются операторами рождения и уничтожения, как в задаче об осцилляторе. В случае бозе-частиц их матричные элементы имеют такой же вид, как и для осциллятора (4.12):

$$\begin{aligned} \hat{b}_i |N_1, N_2, \dots, N_i = n, \dots\rangle &= \sqrt{n} |N_1, N_2, \dots, N_i = n - 1, \dots\rangle; \\ \hat{b}_i^+ |N_1, N_2, \dots, N_i = n, \dots\rangle &= \sqrt{n + 1} |N_1, N_2, \dots, N_i = n + 1, \dots\rangle. \end{aligned} \quad (11.8)$$

В частности, любое состояние можно получить действием необходимого числа операторов рождения на вакуумное (основное) состояние $|0\rangle$ (состояние, в котором нет частиц),

$$|N_1, \dots, N_k, \dots\rangle = \sqrt{N_1! \dots N_k! \dots} \left(\hat{b}_1^+\right)^{N_1} \dots \left(\hat{b}_k^+\right)^{N_k} \dots |0\rangle. \quad (11.9)$$

Переход одной частицы из состояния "а" в состояние "b" описывается (с точностью до коэффициентов) оператором $\hat{b}_b^+ \hat{b}_a$,

$$\begin{aligned} &\hat{b}_b^+ \hat{b}_a |\dots, N_a = n_a, \dots, N_b = n_b, \dots\rangle \\ &= \sqrt{(n_b + 1)n_a} |\dots, N_a = n_a - 1, \dots, N_b = n_b + 1, \dots\rangle. \end{aligned}$$

По определению, операторы рождения и уничтожения, действующие на разные состояния, коммутируют друг с другом. Поэтому имеют место

¹Можно использовать и другой полный ортонормированный набор векторов состояний частицы, в этом случае формулы выглядят немного сложнее.

естественные обобщения перестановочных соотношений (4.5)

$$[\hat{b}_i, \hat{b}_k^+] = \delta_{ik}, \quad [\hat{b}_i, \hat{b}_k] = 0, \quad [\hat{b}_i^+, \hat{b}_k^+] = 0. \quad (11.10)$$

Для ферми-частиц числа заполнения N_i могут принимать только значения 0 и 1, и соответствующие операторы рождения и уничтожения антикоммутируют (что гарантирует выполнение принципа Паули),

$$\hat{a}_i \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_i = \delta_{ik}, \quad \hat{a}_i \hat{a}_k + \hat{a}_k \hat{a}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_k^+ + \hat{a}_k^+ \hat{a}_i^+ = 0. \quad (11.11)$$

◇ При учёте взаимодействия числа заполнения начинают эволюционировать со временем, и эта эволюция описывается гамильтонианом, записанным в представлении вторичного квантования.

Пусть взаимодействие \hat{V} в гамильтониане (11.7) складывается из энергий взаимодействия пар частиц² $\hat{V} = \sum H^2(ab)$. Здесь a и b обозначают координаты частиц a и b .

Обозначим через $|i\rangle$ собственные векторы одночастичного гамильтониана \hat{H}^1 и через E_i соответствующие значения энергии так, что

$$\hat{H}^1 = \sum E_i |i\rangle \langle i|. \quad (11.12a)$$

В этом базисе оператор \hat{H}^2 записывается в виде матрицы

$$H_{ii'kk'}^2 = \langle i | \langle i' | H_{ab}^{(2)} | k \rangle | k' \rangle \rangle.$$

В представлении чисел заполнения нетрудно получить (подобно тому, как это делалось при описании разных операторов в энергетическом представлении для осциллятора)

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \sum_i E_i^1 b_i^+ b_i + \hat{V} \equiv \sum E_i N_i + \hat{V}, \\ \hat{V} &= \sum_{i,i',k,k'} H_{ii'kk'}^2 b_i^+ b_{i'}^+ b_k b_{k'}. \end{aligned} \quad (11.12b)$$

Подобные представления можно построить и для других операторов. В силу тождественности частиц операторы физических величин исчерпываются такими наборами.

◆ Далее нередко переходят к операторам $\hat{\psi}$ в q -представлении: (ср. обозначения разд. 1.3)

$$\hat{\psi}(q) = \sum_i \hat{b}_i \langle q | i \rangle, \quad \hat{\psi}^+(q) = \sum_i \hat{b}_i^+ \langle i | q \rangle \quad (11.13)$$

²Можно рассмотреть таким же способом и трехчастичные члены и т.д.

Эти соотношения выглядят, как разложение волновой функции по базису $\langle q|i\rangle$, коэффициенты которого \hat{b} стали операторами.

Если базис $\langle q|i\rangle$ — ортонормированный, то перестановочные соотношения (11.10) принимают вид

$$[\hat{\psi}(q), \hat{\psi}(q')] = 0, \quad [\hat{\psi}(q), \hat{\psi}^+(q')] = \delta(q - q'). \quad (11.14)$$

При этом взамен (11.12b) можно записать

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \int \hat{\psi}^+(q) \hat{H}^{(1)} \hat{\psi}(q) dq; \\ \hat{H}_2 &= \int \hat{\psi}^+(q) \hat{\psi}^+(q') \hat{H}^{(2)} \hat{\psi}(q') \hat{\psi}(q) dq dq'. \end{aligned} \quad (11.15)$$

Разумеется, подобные операторы должны быть введены для каждого сорта встречающихся частиц. Как отмечено выше, для спинорных частиц алгебра при этом немного другая.

■ Взаимодействие электронов с решёткой.

В кристаллах за счет колебаний ионы смещены от положения равновесия, так что электроны движутся в потенциале, отличающемся от периодического. Пока отклонения от положения равновесия невелики (т.е. число фононов мало), их можно описать как возмущения. Изменение энергии электрона из-за смещения иона от равновесного положения имеет вид $-e\rho(x)dU/dx\Delta x$. Здесь $U(x)$ — потенциал поля, создаваемого ионами, а $\rho(x) = \psi^*(x)\psi(x)$ — плотность числа электронов в точке x . Вблизи положения равновесия сила пропорциональна смещению, $e dU/dx = -F$. В итоге, суммируя по всем ионам, получаем $V = F \sum_n \psi^*(x_n)\psi(x_n)\Delta x_n$.

Выполним разложение по собственным функциям оператора конечного сдвига — преобразование Фурье. Для смещений оно дается соотношениями (6.19), а для электронов — соотношениями (6.4). В методе вторичного квантования коэффициенты последнего разложения приобретают смысл операторов рождения и уничтожения электронов. С учетом ортонормированности собственных функций оператора сдвига из выписанного выражения получается *гамильтониан электрон—фононного взаимодействия* (Фрёлиха), где сумма берётся по всем значениям квазиимпульсов p и k , а $u_p(x)$ — блоховская амплитуда (6.3)

$$\begin{aligned} \hat{V} &= \sum_{p,k} \frac{g_{pk}}{N\sqrt{M\omega_k}} \hat{a}_p^+ \hat{a}_{p-k} \left(\hat{b}_k + \hat{b}_{-k}^+ \right), \\ g_{pk} &= F \int_{cell} u_p(x) u_{p-k}(x) dx. \end{aligned} \quad (11.16)$$

(Последний интеграл берется по элементарной ячейке.)

Такой гамильтониан широко используется при описании процессов в кристаллах. В частности, в середине 50-х г.г. при экспериментальном исследовании сверхпроводимости был обнаружен изотопический эффект – зависимость температуры сверхпроводящего перехода от массы иона. В соответствии с (11.16), это послужило основой для понимания того факта, что сверхпроводимость обусловлена электрон–фононным взаимодействием. Вскоре после этого и была построена теория сверхпроводимости.

11.2. Задачи

1. Покажите, что независимо от величины спина каждой из пары частиц координатная волновая функция симметрична при чётном суммарном спине и антисимметрична при нечётном суммарном спине.
2. Найти энергетический спектр системы из двух тождественных частиц с потенциалом взаимодействия $U = k(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2/2$ при различных значениях полного спина системы, считая частицы
 1. бесспиновыми,
 2. имеющими спин $1/2$ (электронами),
 3. имеющими спин 1 .
4. Два фермиона помещены в поле $kx_i^2/2$ и взаимодействуют по закону bx_1x_2 . В 1-м порядке теории возмущений найти поправки к 4 нижшим уровням в состояниях с различным полным спином. Сравнить с точным решением.
5. Две частицы в параллелепипеде с рёбрами a, b, c взаимодействуют по закону $\mathcal{U} = \mathcal{U}_0\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$. Найти поправки 1-го порядка к энергиям двух нижних состояний, считая частицы
 1. различными (рассмотреть случаи равных и неравных масс);
 2. тождественными со спином 0 ;
 3. тождественными со спином $1/2$.

В последнем случае определить вероятность того, что обе частицы находятся в левой половине объема при заданном полном спине s .

4. Найти собственные значения и собственные векторы операторов, построенных для двух осцилляторов:

$$\hat{V} = \hat{b}_1^+\hat{b}_2 + \hat{b}_2^+\hat{b}_1, \quad \hat{C} = i \left(\hat{b}_1\hat{b}_2^+ - \hat{b}_2\hat{b}_1^+ \right).$$

Глава 12

АТОМЫ И МОЛЕКУЛЫ.

Рассматриваются *начальные элементы* физики атомов и молекул.

12.1. Атом

Электронные конфигурации в атоме. Рассмотрим атом, имеющий ядро с зарядом Ze и Z электронов. Мы будем говорить только о движении относительно центра масс, который практически совпадает с ядром, его мы считаем бесконечно тяжелым.

В атоме каждый из электронов движется в поле, создаваемом ядром и всеми другими электронами. Найти точное решение для такой задачи не удастся. Хорошее описание удастся получить с помощью теории возмущений, где невозмущенный гамильтониан \hat{H}_0 описывает приближение невзаимодействующих электронов.

В приближении невзаимодействующих электронов каждый электрон в отдельности движется в эффективном "самосогласованном" центральном поле $V(r)$, создаваемом ядром и остальными электронами. Это поле убывает с расстоянием быстрее кулоновского. Вблизи ядра $V(r) \approx Ze^2/r$ (наружные электроны не создают поля внутри). На больших расстояниях от ядра $V(r) \sim e^2/r$ (внешний электрон "видит" однократно заряженный положительный ион).

Состояния электрона в этом поле характеризуются определенным значением орбитального момента ℓ . Различные состояния с данным ℓ нумеруются главным квантовым числом $n \equiv n_r + \ell + 1$ – по образцу атома водорода, а полный набор составляют: n , ℓ , проекции момента и спина на избранную ось, m и s_z . Поскольку эффективное поле отличается от кулоновского, состояния с данным n и разными ℓ не вырождены.

Эти состояния отдельного электрона обозначают символом $n\ell$, где для ℓ используют буквы s, p, d, f, \dots (1), а для n – его численное значение.

Так, состояние $4f$ обозначает состояние электрона с $n = 4$, $\ell = 3$. Чтобы описать состояние атома, указывают состояния каждого из электронов, причем все состояния с одинаковыми n и ℓ записывают однократно, добавляя в конце «показатель степени» – число таких электронов – это и есть запись *электронной конфигурации*. Так, электронная конфигурация $2s^2 2p^4 3s^2 3d$ есть конфигурация 9 электронов – 2 в состоянии $n = 2$, $\ell = 0$, 4 в состоянии $n = 2$, $\ell = 1$, 2 в состоянии $n = 3$, $\ell = 0$, 1 в состоянии $n = 3$, $\ell = 2$. Все возможные состояния с данным n и различными ℓ (их $2n^2$) образуют *электронную оболочку*.

Как и для атома водорода, с ростом n растет средний радиус электронных орбит, так что оболочки с $n = 1, 2$ – внутренние, а с большими n – внешние.

В рассматриваемом приближении с учётом тождественности электронов коллективные волновые функции записывают в виде детерминантов из функций, соответствующих одноэлектронным состояниям (11.3b). Угловые зависимости даются сферическими гармониками (7.17a), а радиальные волновые функции близки к радиальным функциям для атома водорода (8.14) для внешних электронов и к подобным функциям для водородоподобного атома с ядром заряда Ze для электронов с $n = 1$.

Следующее приближение к рассмотренной картине учитывает два типа взаимодействий:

- (Кулоновское) взаимодействие электронов друг с другом, зависящее от расстояния между ними (*корреляционные силы*).
- Взаимодействие спинового магнитного момента с орбитальным (*спин-орбитальное взаимодействие*). – В большинстве случаев это взаимодействие слабее корреляционного.

Сюда можно добавить еще более слабые поправки – спин-спиновое магнитное взаимодействие спиновых магнитных моментов разных электронов, кинетические релятивистские поправки и др. Мы не входим в такие детали описания.

С учётом этих взаимодействий электронная конфигурация не полностью определяет состояние атома. Под действием этих возмущений орбитальные моменты и спины различных электронов могут по-разному сложиться в полный орбитальный L и спиновый S моменты атома ($\vec{L} = \sum \vec{\ell}_i$, $\vec{S} = \sum \vec{s}_i$), а те в свою очередь – в полный момент атома J ($\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$). Полное описание состояния атома включает и его электронную конфигурацию и значения J, L, S . Стандартное обозначение состояния

атома как целого имеет вид $^{2S+1}L_J$. При этом значение L записывается прописной буквой в соответствии с обозначениями (1), а для $2S + 1$ и J выписываются их численные значения. Например, ${}^6H_{15/2} \Rightarrow S = 5/2, L = 5, J = 15/2$ и ${}^3D_2 \Rightarrow S = 1, L = 2, J = 2$. Полное же описание включает в себя и эти данные и описание электронной конфигурации, например $1s^2 2s^2 2p, {}^2P_{3/2}$.

Корреляционные силы (взаимодействие электронов друг с другом) нарушают сферическую симметрию для отдельного электрона. Используем обсуждавшееся в разделе 10.1 соответствие $\vec{r} \propto \vec{\ell}$. Тогда зависящую от углов часть этого возмущения мы запишем в виде

$$V_{corr} = \sum \gamma_{ij}(\vec{\ell}_i \vec{\ell}_j). \quad (12.1)$$

Если это – наибольшее возмущение, его действие приводит к тому, что моменты отдельных электронов складываются в суммарный орбитальный момент атома $\vec{L} = \sum \vec{\ell}_i$. Далее, состояние с определенным значением L соответствует определенной симметрии волновой функции по перестановкам пространственных координат отдельных электронов. В свою очередь, с учетом принципа Паули, это соответствует определенной симметрии спиновой волновой функции коллектива электронов, т.е. определенному значению суммарного спина $\vec{S} = \sum \vec{s}_i$ (наподобие того, как об этом говорилось при обсуждении состояний пары электронов и обменного взаимодействия в разделе 11.1.1).

Спин–орбитальное взаимодействие. На электрон, движущийся со скоростью \vec{v} в электрическом поле $\vec{\mathcal{E}}$, действует магнитное поле $\vec{B} = -[\vec{v} \times \vec{\mathcal{E}}]/c$. Поскольку $e\vec{\mathcal{E}} = -(\vec{r}/r)dV/dr$, то¹

$$\vec{B} = -[\vec{r} \times \vec{v}] \frac{(dV/dr)}{erc} = -\frac{\hbar}{emcr} (dV/dr) \vec{\ell}.$$

В итоге энергия взаимодействия спинового магнитного момента с этим полем (спин–орбитальное взаимодействие) есть

$$V_{ls} = -\vec{\mu}_s \vec{B} = \frac{\hbar^2}{m^2 c^2 r} V'(r) \cdot \vec{\ell} \vec{s}. \quad (12.2)$$

Усреднение по объёму даёт теперь

$$\langle V_{ls} \rangle = \beta(\vec{\ell} \vec{s}). \quad (12.3)$$

¹ Система отсчета, связанная с электроном в магнитном поле, неинерциальна. Поэтому расчет должен быть более аккуратным. Такой расчет уменьшает результат вдвое.

Чтобы оценить величину β , запишем

$$\beta \sim \left(\frac{\hbar}{mc} \right)^2 \frac{\langle V \rangle}{\langle r \rangle^2}.$$

Среднее значение V близко к энергии уровня $E_{n\ell} \sim R_y(Z/n)^2$, а $\langle r \rangle$ – близко к радиусу орбиты $a_B(n/Z)$. $\beta \sim \alpha^2(Z/n)^4 R_y$ (Здесь $Z \gg 1$, $n \sim 1$. Поэтому для внутренних электронов тяжелого атома это взаимодействие может быть значительным.) Точно так же для наружных электронов ($n \gg 1$) $\beta \sim \alpha^2 R_y/n^4$, и спин–орбитальное взаимодействие незначительно.

В не очень тяжелых атомах и для наружных электронов тяжелых атомов спин–орбитальное взаимодействие слабее V_{corr} . В этом случае для системы электронов $V_{\ell s} = \sum_a \beta_a (\vec{\ell}_a \vec{s}_a) \Rightarrow \beta \vec{L} \vec{S}$ (12.2). Это взаимодействие приводит к расщеплению уровней – *тонкая структура*. Напомним, что в соответствии с изложенным в разделе 10.1 $\langle \vec{L} \vec{S} \rangle = [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]/2$. Поэтому расщепление уровней тонкой структуры есть $AJ(J+1)/2$, а расстояние между ними $\Delta E_{J,J-1} = AJ$.

Для внутренних электронов тяжелых атомов спин–орбитальное взаимодействие для отдельных электронов иногда сильнее V_{corr} . Тогда первая поправка соответствует тому, что сначала формируются полные моменты отдельных электронов $\vec{j}_a \equiv \vec{\ell}_a \vec{s}_a$, а затем уже возмущение V_{corr} дает полный момент $\vec{J} = \sum \vec{j}_a$. Этот случай называют случаем *jj* – связи.

■ Периодическая система элементов

Теперь мы готовы к тому, чтобы понять природу периодической зависимости химических свойств элемента от его атомного номера – периодической таблицы Менделеева.

Начнем с описания основного состояния некоторого атома. Электроны заполняют состояния с наименьшими возможными энергиями, допускаемые принципом Паули. При описании их конфигурации мы используем полученные в разд. 8.1 выводы:

При заданном n энергия состояния растет с ростом ℓ . Наоборот, при заданном значении ℓ энергия состояния растет с ростом n .

Пусть теперь к первоначально "голому" ядру по одному добавляются электроны. Первый из них займет самое низкое состояние $1s$. Следующий попадет в то же состояние, но спины этих электронов будут противоположно направлены так, что их сумма равна нулю. 1-я оболочка заполнена, это $1s^2$. Если $Z = 2$, то этим все и кончается, мы имеем атом

инертного газа He .

Следующие 2 электрона попадают в состояния $2s$, давая нулевой вклад в суммарный спин, это $2s^2$. Далее заполняется оболочка $2p$, которая может содержать до $6 = 2(2\ell + 1)$ электронов. В последнем случае все проекции момента и спина встречаются по одному разу, т.е. суммарные момент и спин этих электронов равны нулю. Этим заканчивается заполнение 2-й оболочки – 8 электронов. Если $Z = 10$, то этим все и кончается, мы имеем атом инертного газа Ne .

Теперь заполняется 3-я оболочка. Опять сначала заполняются состояния $3s^2$, а затем электроны (не более 6) садятся на уровень $3p$. При $Z = 18$ мы имеем атом инертного газа Ar с электронной конфигурацией $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$.

Далее следовало бы ожидать заполнения состояний $3d$. Но оказывается, что энергия $4s$ -состояний меньше, и заполняются сначала $4s$ -состояния. Только после этого заполняются $3d$ -состояния, а уж затем $4p$. Если $Z = 36$ (инертный газ Kr), то этим все и кончается.

Описанный сбой в заполнении электронных оболочек происходит из-за того, что волновые функции состояний с малыми моментами (s и p) подходят ближе к ядру и больше чувствуют область сильного потенциала. В результате энергия этих оболочек оказывается равной или меньшей, чем у оболочек с меньшими n , но большими моментами. Так, оболочка $4s$ заполняется раньше, чем $3d$, а оболочка $5s$ одновременно с $4d$. Оболочки ($6s, 4f, 5d$) и ($7s, 5f, 6d$) заполняются в указанной последовательности.

Понятно, что для инертных газов $L = S = J = 0$. А как определяются эти величины для незаполненных оболочек? Ответ на этот вопрос дает эмпирическое **правило Хунда**:

наименьшей энергией обладает терм с наибольшим возможным при данной электронной конфигурации значением S и наибольшим (возможным при этом S) значением L .

Физический смысл этого требования следующий: чем более близки будут наборы квантовых чисел различных электронов данной оболочки, тем более принцип Паули будет им препятствовать находиться в одних и тех же точках пространства и тем меньше будет энергия их взаимного отталкивания.

Что касается значения J , то оно определяется знаком константы LS взаимодействия β . При $\beta > 0$ наименьшим является состояние с наибольшим возможным значением $J = L + S$, при $\beta < 0$ наименьшим является

состояние с наименьшим возможным значением $J = |L - S|$.

Пример: оболочка $3p^3$. Возможные состояния $|m, s_z\rangle$ с $m = \pm 1, 0$ и $s_z = \pm 1/2$. Наибольшее значение s_z достигается в конфигурации $|1, 1/2\rangle$, $|0, 1/2\rangle$, $|-1, 1/2\rangle$. Суммарное значение $S_z = 3/2$, а $L = 0$. Это — максимальное значение S_z . Соответственно, в основном состоянии спектральный терм атома есть $^4S_{3/2}$.

Химические свойства атома определяются наименее сильно связанными с ядром *валентными* электронами внешней оболочки, т.е. числом занятых и свободных мест в этой оболочке и *энергией связи*, которая нужна для удаления одного из этих электронов из атома.

При описанной выше инверсии заполнения ($4s, 3d, 4p$) волновые функции состояний с большим n простираются дальше и во внешнюю область атома. Именно они оказываются теми внешними электронами, которые определяют химические свойства. В результате для любого атома эти свойства определяются (в основном) s - и p - электронами внешней оболочки, а элементы с разным количеством электронов в d - оболочке обладают близкими свойствами (переходные металлы). Последнее утверждение еще точнее для f - оболочек, которые порождают семейства элементов близнецов — редкие земли (лантаноиды) и актиниды.

Повторяемость структуры верхних оболочек при росте Z и обуславливает периодичность в зависимости свойств элементов от их атомного номера (и веса). В частности, элементы, у которых в наружной оболочке находится только один электрон — щелочные металлы (кроме водорода, $n = 1$), легко отдающие этот электрон в химических связях. Стоящие перед ними в таблице элементы с полностью заполненной верхней оболочкой — инертные газы, не проявляющие никакого интереса к химическому обмену электронами. Элементы, стоящие перед инертными газами — галогены, у которых во внешней p -оболочке имеется по одному свободному состоянию, и они проявляют сильную химическую активность в стремлении заполнить его чужим электроном.

12.2. Элементы описания молекулы

Квантовомеханическая теория молекул сложнее теории атомов, поскольку здесь существенно также и движение ядер. Мы не обсуждаем здесь разных типов связи, склеивающих молекулу из атомов. Во всех случаях, однако, существенную роль играет *очень малый параметр* — отношение массы электрона к массе ядра $\gamma = m/M \lesssim 10^{-4}$. На его приме-

нении основано *адиабатическое приближение*. Физический смысл этого приближения — электроны движутся значительно быстрее ядер, так что электронная конфигурация молекулы "подстраивается" под мгновенное положение ядер. Уравнение Шредингера для стационарных состояний молекулы имеет вид:

$$\left(\sum_{i=1}^n \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_{j=1}^N \frac{\hat{P}_j^2}{2M_j} + V \right) \psi = E\psi. \quad (12.4)$$

Здесь n — число электронов, N — число ядер, V — суммарная энергия взаимодействия электронов с ядрами и между собой.

Выделим теперь поступательное движение молекулы как целого и займёмся описанием молекулы самой по себе.

В первом адиабатическом приближении мы пренебрегаем кинетической энергией ядер. При этом ядерные j -координаты входят в уравнение только как параметры потенциальной энергии V . Соответственно, мы ищем полную волновую функцию в виде

$$\psi(\vec{r}_i, \vec{R}_j) = \phi_{\vec{R}_j}(\vec{r}_i) \chi(\vec{R}_j), \quad (12.5)$$

где электронная часть удовлетворяет уравнению

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \Delta_i + V \right) \phi_{R_j}(\vec{r}_i) = U(\vec{R}_j) \phi_{R_j}(\vec{r}_i). \quad (12.6)$$

Для каждой ядерной конфигурации $U(\vec{R}_j)$ получается как собственное значение энергии в уравнении (12.6). Если теперь мы подставим в (12.4) волновую функцию в виде (12.5) и учтём (12.6), то для ядерной части волновой функции $\chi(\vec{R}_j)$ получается приближенное уравнение

$$\left(-\sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_j} \Delta_j + U(\vec{R}_j) \right) \chi(\vec{R}_j) = E\chi(\vec{R}_j). \quad (12.7)$$

Существование молекулы как связанной системы предполагает, что $U(\vec{R}_j)$ имеет минимум, определяющий равновесную конфигурацию ядер. Вблизи этого минимума в движении ядер выделяются вращение равновесной ядерной конфигурации, как целого (т.е. вращение всей молекулы), и внутренние колебания ядер относительно их равновесных положений. Оценим характерные энергии этих движений для молекул, содержащих не слишком много атомов, имея в виду, что при характерном размере

молекулы a энергия U и её характерные изменения на масштабе a определяются масштабом локализации, т.е. составляют величины порядка $E_e = \hbar^2/ma^2$.

Колебательные уровни. Для небольших отклонений от положений равновесия \vec{R}_{j0} разложение "потенциальной энергии" по отклонению начинается с квадратичных членов, и масштаб этой зависимости определяется размером a . Поэтому можно записать

$$\Delta U(\vec{R}_j) \sim E_e \left(\frac{\Delta \vec{R}_j}{a} \right)^2 = \frac{k_{eff}}{2} (\Delta \vec{R}_j)^2, \quad k_{eff} \approx \frac{\hbar^2}{ma^4}.$$

Тогда энергии нормальных колебаний ядерной конфигурации

$$E_{osc} \sim \hbar \sqrt{\frac{k_{eff}}{M}} \sim \frac{\hbar^2}{\sqrt{mMa^2}} \sim \sqrt{\frac{m}{M}} E_e = \sqrt{\gamma} E_e. \quad (12.8)$$

Вращательные уровни. Характерная энергия углового движения получается из (12.7), если считать все $R_j \sim a$:

$$E_{rot} \sim \frac{\hbar^2}{Ma^2} \sim \frac{m}{M} E_{el} = \gamma E_{el}. \quad (12.9)$$

Поскольку характерные размеры молекул $a \sim$ нескольких \AA , электронные энергии $E_{el} \sim 1$ эВ соответствуют частотам переходов, лежащим в видимой и ультрафиолетовой областях спектра. Колебательные энергии примерно в 100 раз меньше, и соответствующие частоты лежат в инфракрасной области. Вращательные энергии меньше еще в 100 раз, их частоты попадают в далекую инфракрасную область. Здесь расстояния между уровнями сравниваются с их радиационными ширинами и тепловым (Доплеровским) уширением. В результате вместо отдельных тонких спектральных линий наблюдаются целые спектральные полосы (полосатые спектры). Так обстоит дело в некоторых молекулярных газах.

Глава 13

СИСТЕМЫ С ГАМИЛЬТониАНОМ, ЗАВИСЯЩИЙ ОТ ВРЕМЕНИ

В этой главе мы рассмотрим системы с гамильтонианом, зависящим от времени. Чаще всего это – системы, находящиеся под действием внешнего поля, но это могут быть и распадающиеся системы, которые *удобно* описывать разными гамильтонианами до и после распада, и др.

13.1. Постановка вопроса и общий подход

∇ Пусть до "начала событий" система описывалась гамильтонианом \hat{H}_i с известными собственными состояниями $|k; i\rangle$ и уровнями энергии E_{ik} (i – initial). В этой главе мы различаем вектор $|k; i\rangle$ – не зависящее от времени решение стационарного уравнения Шредингера с гамильтонианом \hat{H}_i , и зависящий от времени вектор $|k(t); i\rangle$ – решение полного уравнения Шредингера с тем же гамильтонианом и с той же энергией:

$$i\hbar \frac{d|k(t); i\rangle}{dt} = \hat{H}_i |k(t); i\rangle, \quad |k(t); i\rangle = |k; i\rangle e^{-E_{ik}t/\hbar}. \quad (13.1)$$

∇ Начиная с момента $t = t_0$ гамильтониан начал меняться под действием *возмущения* $\hat{V}(t)$ (ниже мы обычно принимаем $t_0 = 0$):

$$\hat{H}_i \rightarrow \hat{H} = \hat{H}_i + \hat{V}(t), \quad V(t < t_0) = 0. \quad (13.2)$$

∇ "После конца событий", при $t \rightarrow \infty$, система переходит в конечное состояние, которое описывается гамильтонианом $\hat{H}_f = \hat{H}_i + \hat{V}(\infty)$ с аналогичными собственными векторами $|r; f\rangle$ и $|r(t); f\rangle$ и уровнями энергии E_{fr} (f – final).

◇ В такой системе нет стационарных состояний.

При её описании основная задача – найти вероятности переходов из начального состояния $|k; i\rangle$ в одно из состояний $|r; f\rangle$.

Наблюдение за системой в промежуточный момент времени необратимо изменяет её, результат последующей эволюции искажается. Поэтому ответ на вопрос: *А что случилось с системой "по дороге" из $|k; i\rangle$ в $|r; f\rangle$?* не содержит измеримой информации. Он может зависеть от применяемого метода описания (в отличие от физически осмысленного нашего вопроса, ответ на который обязан быть независимым от способа описания). Содержательный вопрос касается только сопоставления картин «до начала событий» и «после конца событий». «Промежуточные» моменты можно выделить только с некоторой ограниченной точностью.

■ Общий подход.

Обычно решения уравнения Шредингера ищут в виде разложения по собственным функциям исходного гамильтониана (13.1):

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = (\hat{H}_i + \hat{V}(t))|\psi(t)\rangle, \quad |\psi(t)\rangle = \sum_k a_k(t)|k(t); i\rangle. \quad (13.3)$$

Подставим это разложение в выписанное уравнение Шредингера. Производная по времени от множителя $|k(t); i\rangle$ в левой части уравнения даёт вклад, компенсирующий $\hat{H}_i|k(t); i\rangle$ в правой части. Умножая после этого результат слева на $\langle m; i|$, получим *уравнение Шредингера в представлении взаимодействия* (ср. гл. 3):

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{da_m}{dt} &= \sum_k \tilde{V}_{mk}(t)a_k(t), \\ \tilde{V}_{mk}(t) &= \langle m(t); i|V(q, t)|k(t); i\rangle \equiv V_{mk}(t)e^{i\omega_{mk}t}, \\ \omega_{mk} &= \frac{E_m^0 - E_k^0}{\hbar}. \end{aligned} \quad (13.4)$$

Это уравнение определяет закон эволюции состояний "старого" базиса $\{|k; i\rangle\}$ под действием нашего возмущения. (Оператор \tilde{V} получается из \hat{V} с помощью оператора эволюции \hat{U}_0 (2.5а), (2.5с) так же, как получались операторы физических величин (3.1) в гайзенберговской картине.)

▽ Удобно брать в качестве начального одно из стационарных состояний исходной системы $|n; i\rangle$. При этом $a_k(t=0) = \delta_{kn}$. Коэффициенты a_k в этом случае мы будем иногда снабжать вторым индексом (n), т.е.

$a_k \rightarrow a_{k(n)}$. Для состояния $|\psi\rangle$ (13.3), получающегося в этом случае, мы используем специальное обозначение $|n_V(t)\rangle$,

$$|n_V(t)\rangle = \sum_k a_{k(n)}(t) |k(t); i\rangle : \quad (|n_V(t=0)\rangle = |n; i\rangle) . \quad (13.5)$$

◆ *Амплитудами перехода* называют коэффициенты разложения этого вектора по собственным векторам конечного состояния при $t \rightarrow \infty$,

$$A_{mn} \equiv A_{m(f)n(i)} = \langle m(t); f | n_V(t) \rangle |_{t \rightarrow \infty} . \quad (13.6a)$$

Вероятности перехода получается отсюда стандартным образом:

$$w_{mn} = |A_{mn}|^2 . \quad (13.6b)$$

Обычно рассматривают три варианта конечных состояний.

1. "После событий" возмущение выключается, и форма гамильтониана восстанавливается¹, т.е. набор $\{|k; f\rangle\}$ совпадает с набором $\{|k; i\rangle\}$.

2. После действия возмущения возникает новая система, с новым гамильтонианом (например, при распаде ядер, ионизации,...), и необходимо еще найти стационарные состояния $|k; f\rangle$.

3. Включается периодическом поле (например, на систему действует поле лазерной волны), в котором стационарных состояний вообще нет, и наше понятие амплитуды перехода не определено.

◆ При описании переходов в непрерывный спектр физический интеграл представляет вероятность перехода из состояния $|k; i\rangle$ не в одно состояние $|r; f\rangle$, но в целую группу близких состояний. Соответствующее изменение постановки задачи обсуждается в разд. 13.4.

13.2. Теория возмущений

Во многих случаях возмущение $\hat{V}(t)$ можно считать малым, и для решения возникающих задач применима теория возмущений. Добавку

¹Этот подход используют при описании сложных систем. В частности, принимают, что в твердом теле при $t \rightarrow -\infty$ электроны были невзаимодействующими, затем "включилось" взаимодействие их друг с другом и с колебаниями решётки (с фононами). Эффект же этих взаимодействий изучается фактически в предположении, что при $t \rightarrow \infty$ взаимодействия "выключились". Физически осмысленные результаты такого подхода не зависят от закона "включения" и "выключения" взаимодействия.

$\hat{V}(t)$ в гамильтониан можно считать малым возмущением до тех пор, пока под ее действием невозмущенное решение меняется "не очень сильно", т.е. $|a_k(t) - \delta_{kn}| \ll 1$.

В этих условиях первое приближение в решении уравнения (13.4) получается, если подставить в его правую часть нулевое приближение, $a_{k(n)} = \delta_{kn}$. Тогда это уравнение легко решается:

$$a_{m(n)}(t) = \delta_{mn} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt'. \quad (13.7)$$

Полученное соотношение определяет закон эволюции состояний "старого" базиса $\{|k; i\rangle\}$ под действием нашего возмущения. В соответствии с (13.5) состояние $|n; i\rangle$ с течением времени переходит в состояние

$$|n_V(t)\rangle = |n(t); i\rangle - \frac{i}{\hbar} \sum_m \int_0^t V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}(t' - t)} dt' |m(t); i\rangle. \quad (13.8)$$

Множитель $e^{-i\omega_{mn}t}$ возник при переходе от базиса $|m; i\rangle$ к базису $|m(t); i\rangle$.

Амплитуда перехода из состояния $|n; i\rangle$ начального гамильтониана в состояние $|m; f\rangle$ вычисляется с помощью соотношения (13.6а). Соотношение (13.8) описывает разложение вектора состояния, который получился из исходного под действием нашего возмущения, $|n_V(t)\rangle$, по векторам состояния исходного базиса $\{|k(t); i\rangle\}$. Для вычисления амплитуды перехода удобно разложить по векторам того же базиса и базисные векторы конечного состояния $|r(t); f\rangle$. В первом приближении обычной теории возмущений (5.9), отвечающем выписанному приближению для $|n_V(t)\rangle$, искомое разложение имеет вид

$$|n(t); f\rangle = |n(t); i\rangle - \sum_{k \neq n} \frac{V_{kn}(\infty)}{\hbar\omega_{kn}} |k(t); i\rangle. \quad (13.9)$$

Рассмотрим применения полученных результатов в различных задачах.

◆ **А. Возмущение действует какое-то время, а затем выключается, $V(t) \rightarrow 0$ при $t \rightarrow \infty$** – вариант 1 разд. 13.1. Тогда в конце мы опять имеем дело с невозмущенной системой, набор новых волновых векторов $\{|n; f\rangle\}$ совпадает с исходным $\{|n; i\rangle\}$, и *амплитуды перехода совпадают с коэффициентами $a_{m(n)}$ (13.7)*.

Вероятность перехода из начального состояния $|n; i\rangle$ в конечное $|m; f\rangle \equiv |m; i\rangle$ равна (при $m \neq n$)

$$w_{mn} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t} dt \right|^2 \quad \left(\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar} \right). \quad (13.10)$$

◆ **Б. Возмущение, раз возникнув, затем действует неограниченно долго, $V(t) \rightarrow V(\infty)$ при $t \rightarrow \infty$** – вариант 2 разд. 13.1.

При этом новый набор собственных функций отличается от старого, $\{|n; f\rangle\} \neq \{|n; i\rangle\}$, см. (13.9). Проинтегрируем выражение $a_{m(n)}$ (13.7) при $m \neq n$ по частям (до перехода к пределу $t \rightarrow \infty$) и учтём, что в подстановке вклад на нижнем пределе исчезает ("до начала событий" возмущение отсутствовало):

$$a_{m(n)} = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_{mn}(t') e^{i\omega_{mn}t'} dt' = -\frac{V_{mn}(t) e^{i\omega_{mn}t}}{\hbar\omega_{mn}} \Big|_0^t + \int_0^t \frac{dV_{mn}(t')}{dt'} \frac{e^{i\omega_{mn}t'}}{\hbar\omega_{mn}} dt'.$$

Подставляя теперь в выражение для амплитуды перехода (13.6) найденные выражения для проэволюционировавшего вектора начального состояния $|n_V(t)\rangle$ (13.8) и для базисного вектора конечного состояния (13.9), найдём при $t \rightarrow \infty$ *амплитуду перехода*

$$A_{mn} = \frac{1}{\hbar\omega_{mn}} \int_0^\infty \frac{dV_{mn}}{dt} e^{i\omega_{mn}t} dt. \quad (13.11)$$

∇ При медленном (*адиабатическом*) включении возмущения V (с характерным временем изменения T) экспонента под интегралом множится на "почти постоянную" величину dV/dt , что дает для интеграла величину порядка $1/\omega_{fi}T$. Иными словами, состояние системы не изменяется с точностью до поправок не более $\sim 1/(\omega_{fi}T)^2$.

∇ При внезапном (*быстром*) включении возмущения изменения происходят за столь малое время Δt , что $e^{i\omega_{fi}\Delta t} = 1$. В итоге (ср. следующий раздел)

$$w_{fi} = |V_{fi}/(\hbar\omega_{fi})|^2. \quad (13.12)$$

13.3. Скачкообразное изменение гамильтониана

Пусть гамильтониан меняется к новому значению \hat{H}_f очень быстро, т.е. за время, малое по сравнению с периодами осцилляций между со-

стоянием $|i\rangle$ и другими состояниями $\hbar/|E_i - E_k|$. (Примеры: Атом внутри конденсатора, быстро включается поле; β — распад ядра в атоме). В этом случае ответ получается без предположения о слабости возмущения. Параметром малости является величина $\omega_{fi}\Delta t$, определённая выше.

При $\omega_{fi}\Delta t \ll 1$ волновая функция не успевает измениться при изменении гамильтониана. Но далее она эволюционирует уже по закону, определяемому гамильтонианом \hat{H}_f с собственными векторами $|n; f\rangle$. Амплитуда перехода в одно из этих состояний есть $\langle n; f|k; i\rangle$, а вероятность этого перехода — $w_{fn,ik} = |\langle n; f|k; i\rangle|^2$. В этом интеграле обе волновые функции взяты в один момент — в момент изменения потенциала ($t = 0$).

• **Пример: Включение поля в осцилляторе**

Пусть заряженный осциллятор находится в основном состоянии $|0\rangle$ в отсутствие внешнего поля. В некоторый момент включается постоянное внешнее поле \mathcal{E} , т.е. постоянная сила $F = e\mathcal{E}$, при этом к гамильтониану добавляется слагаемое $V = -xF$. Новый гамильтониан соответствует осциллятору с той же частотой и со смещённым положением равновесия $x \rightarrow x - a$, $a = F/m\omega^2$ (второй вариант конечных состояний)². При этом $\psi_{k;i}(x) = \psi_k(x - a)$, где $\psi_k(x)$ — хорошо известная волновая функция осциллятора (4.18). Вычислим вероятность того, что система останется в основном состоянии w_{00} , используя волновую функцию (4.17),

$$\begin{aligned} w_{00} &= \left| \int dx C^2 e^{-x^2/2x_0^2} e^{-(x-a)^2/2x_0^2} \right|^2 \\ &= \left| \int dx C^2 e^{-(x^2 - xa + a^2/2)/x_0^2} \right|^2 = \left| \int dx C^2 e^{-(x-a/2)^2/x_0^2 - a^2/4x_0^2} \right|^2 = e^{-F^2/(2\hbar m\omega^3)}. \end{aligned}$$

Аналогичным образом вычисляется и вероятность перехода в n -ое состояние. Простые, но громоздкие вычисления показывают, что вероятности перехода в состояния $|n; f\rangle$ распределены по закону Пуассона (4.25):

$$w_{n0} = \frac{u^n}{n!} e^{-u}, \quad u = \frac{F^2}{2\hbar m\omega^3}. \quad (13.13)$$

Видно, что при небольших значениях F вероятность возбуждения разных состояний быстро падает с ростом n , обычная теория возмущений работает только при очень малых F .

• *Рассмотрите ещё один пример: удар по осциллятору*, т.е. мгновенную передачу частице в осцилляторе некоторого импульса.

²Это означает также, что наше состояние — когерентное состояние нового гамильтониана (4.21) с $\alpha = a/(x_0\sqrt{2})$. Для амплитуд перехода и вероятностей можно воспользоваться теперь результатами раздела 4.2, что немедленно даёт (13.13).

13.4. Периодическое возмущение

Рассмотрим важный случай периодического возмущения

$$\hat{V} = \hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{G}e^{i\omega t} \equiv \hat{F}e^{-i\omega t} + \hat{F}^+e^{i\omega t}. \quad (13.14)$$

(Равенство $\hat{G} = \hat{F}^+$ – следствие эрмитовости оператора \hat{V}).

■ Нерезонансное возмущение.

Рассмотрим сначала случай малого нерезонансного возмущения. При этом можно использовать теорию возмущений. Подставив (13.14) в (13.7), найдем (без учета начального условия)

$$a_{m(n)}(t) = \delta_{mn} - \frac{F_{mn} (e^{i(\omega_{mn}-\omega)t} - 1)}{\hbar(\omega_{mn} - \omega)} - \frac{F_{nm}^* (e^{i(\omega_{mn}+\omega)t} - 1)}{\hbar(\omega_{mn} + \omega)}. \quad (13.15)$$

Это – решение в теории возмущений, оно справедливо только при $|F_{mn}| \ll \hbar|\omega_{mn} - \omega|$.

■ Почти резонансное возмущение

Теория возмущений неприменима, если для какого то уровня m "расстройка" $\epsilon \equiv \omega_{mn} - \omega$ близка к нулю, т.е. если возмущение почти резонансное. В этом случае следует решать уравнение (13.4) в совсем другом приближении, учитывая в первую очередь "резонирующие" уровни, а уж затем остальные. "Резонирующие" уровни в таком случае следует учесть точно, а остальные учесть (если нужно) как малые возмущения.

Для простоты будем считать, что "резонирует" только одна пара уровней, т.е. нет других пар уровней a, b таких, что "расстройка" $\omega_{ab} - \omega$ близка к 0. Тогда в уравнениях (13.4) остается только пара резонирующих уровней, и наша система уподобляется паре связанных классических осцилляторов под воздействием почти резонансной силы. Главный вклад в переходы, содержащий малые частоты $\epsilon \equiv \omega_{mn} - \omega$, дается системой уравнений:

$$i\hbar \frac{da_{m(n)}}{dt} = F_{mn}e^{i\epsilon t}a_{n(n)}; \quad i\hbar \frac{da_{n(n)}}{dt} = F_{mn}e^{-i\epsilon t}a_{m(n)}. \quad (13.16)$$

Здесь учтено, что $\omega_{mn} = -\omega_{nm}$.

Для решения этой системы подставим $a_{n(n)}$ из первого уравнения во второе и найдем

$$\frac{d^2a_{m(n)}}{dt^2} - i\epsilon \frac{da_{m(n)}}{dt} + \frac{F_{mn}^2}{\hbar^2}a_{mn} = 0.$$

Обозначив $\eta = \frac{F_{mn}}{\hbar}$ и $\Omega = \sqrt{\epsilon^2/4 + \eta^2}$ и используя начальное условие $a_{k(n)} = \delta_{kn}$, получим теперь решение этого уравнения:

$$a_{m(n)} = -\frac{i\eta}{\Omega} e^{i\epsilon t/2} \sin \Omega t; \quad a_{n(n)} = \left(\cos \Omega t + \frac{i\epsilon}{2\Omega} \sin \Omega t \right) e^{-i\epsilon t/2}. \quad (13.17a)$$

(Здесь матричный элемент F_{mn} считается действительным). Полезно выписать также

$$|a_{m(n)}|^2 = \frac{\eta^2}{\Omega^2} \sin^2 \Omega t; \quad |a_{n(n)}|^2 = 1 - \frac{\eta^2}{\Omega^2} \sin^2 \Omega t. \quad (13.17b)$$

Полученное решение означает, что система периодически с частотой Ω переходит из состояния $|n0\rangle$ в $|m0\rangle$. – Появились биения, которые становятся тем полнее, чем мы ближе к резонансу – чем меньше ϵ .

∇ Разумеется, это решение справедливо только если получившаяся частота биений $\Omega \ll \omega$. Это условие, кроме требования $\epsilon \ll \omega_{mn}$, налагает также и требование обычной теории возмущений $|F_{mn}| \ll \hbar\omega_{mn}$.

◆ Учёт отброшенных высокочастотных слагаемых (содержащих частоты $\omega \approx \omega_{mn}$, $\omega + \omega_{mn}$) с $a_{n(n)}$ и $a_{m(n)}$ в уравнениях (13.16) лишь несущественно изменит картину. (Эти члены надо учитывать одновременно с вкладом остальных уровней.) Зато учёт переходов в другие состояния приводит к уменьшению вероятности системе находиться в резонансных состояниях, это выглядит как затухание. Поскольку число этих нерезонансных состояний бесконечно велико, через очень большое время система может совсем "уплыть" из резонирующих состояний. Наше рассмотрение справедливо для умеренно больших интервалов времени.

13.5. Переходы в непрерывный спектр

Перейдём теперь к задаче о переходе в непрерывный спектр под действием периодической внешней силы. Важным примером здесь является фотоэффект — явление вылета электронов из атома (или другой системы) под действием света (периодического электромагнитного поля). У этой задачи есть две особенности.

- Состояния непрерывного спектра не локализуются в какой-то конечной области, они соответствуют почти свободно движущимся частицам, которые уходят далеко от нашей системы и потому не могут в нее вернуться (электрон просто улетает от ядра, и не может быть захвачен им). Поэтому обратные переходы здесь не происходят, и биений не возникает.

• Конечных состояний с данной энергией много (например, при фотоэф- фекте электрон может вылететь в произвольном направлении). Скорость ухода из начального (связанного) состояния домножается на число воз- можных конечных состояний.

◆ Для таких систем немного меняется постановка задачи.

Вероятность перехода выражается через амплитуду перехода (13.6а) и плотность числа состояний соотношением

$$dw_{fi} = |A_{fi}|^2(\nu)\rho(\nu)d\nu. \quad (13.18)$$

Мы увидим, что эта вероятность растёт со временем.

Далее предполагается, что в начальном состоянии находится много одинаковых атомных систем, и изучается скорость переходов (их число на единицу времени)

$$r_{fi} = \lim_{t \rightarrow \infty} \int \frac{dw_{fi}}{t} \rho(\nu_f) d\nu_f. \quad (13.19)$$

При этом предполагается, что $r_{fi} \cdot t \ll 1$ так, что число частиц, нахо- дящихся в начальном состоянии N_i за время наблюдения уменьшилось незначительно. При увеличении времени наблюдения следует записать, очевидно,

$$dN_i = -N_i r_{fi} dt \Rightarrow N_i = N_{i0} e^{-r_{fi} \cdot t}. \quad (13.20)$$

◆ Плотность числа состояний.

В рассматриваемых задачах физический интерес представляют веро- ятности перехода не в одно состояние $|f\rangle$, но в целую группу близких состояний. Мы нумеруем эти состояния значком ν и интересуемся пе- реходами в состояния, лежащие в интервале от ν до $\nu + d\nu$. (Часто в качестве ν используется энергия E). Обычно это число пропорциональ- но объёму системы V . Обозначим через $dN = V \rho(\nu) d\nu$ число различных конечных состояний системы, принадлежащих этому интервалу. Функ- цию $\rho(\nu)$ называют *плотностью числа состояний* по ν (приходящихся на единицу объёма).

Разберём случай, когда энергии частиц велики по сравнению с энер- гией взаимодействия V . В этом случае бóльшую часть времени частица проводит в области, где $V = 0$, т.е. её движение — почти свободное. Здесь полезен следующий приём. Сначала всю систему заключают в большой кубический ящик со стороной L (объём $V = L^3$) с непрозрачными стен- ками. В этом случае спектр состояний дискретен, и новые постановки

задач не нужны. Получив решение, переходят к пределу $L \rightarrow \infty$ там, где это возможно.

Для рассматриваемых состояний волновая функция частицы — стоячая волна $\psi = A \sin \pi n_x x / L \sin \pi n_y y / L \sin \pi n_z z / L$. Соответствующий импульс есть $\vec{p} = \pi \hbar (n_x, n_y, n_z) / L$. Реализуются только положительные целые значения n_x, n_y, n_z .

Количество целочисленных значений n_i , при которых импульс попадает в интервал $\Delta^3 p$ (число возможных квантовых состояний в этом интервале) равно $\Delta N = 2L^3 \Delta^3 p / (\pi \hbar)^3$ (множитель 2 связан с наличием двух спиновых состояний для электрона или двух поляризаций для фотона). С учётом того, что при переходе к распределению по величине импульса p надо учесть только положительные n_i , $\Delta^3 p \Rightarrow 4\pi p^2 \Delta p / 8$.

То же число состояний можно получить, считая ящик периодически продолженным на все пространство и наложив условие периодичности на границах. Тогда здесь могут распространяться бегущие волны так, что на период приходится целое число волн $n'_i \lambda = L$. При этом числа n'_i могут быть и положительными и отрицательными. Число возможных квантовых состояний в интервале $\Delta^3 p$ есть $\Delta N = 2L^3 \Delta^3 p / (2\pi \hbar)^3$.

Тот же ответ получается и с помощью квазиклассического приближения, согласно которому (5.28) на элемент $\Delta p \Delta q$ фазового объёма приходится $\Delta p \Delta q / (2\pi \hbar)$ квантовых состояний.

∇ В полярных координатах ($d\Omega_p$ — элемент телесного угла в пространстве импульсов) мы имеем dN и $\rho(|p|)$:

$$\delta N = \frac{V 2p^2 \Delta p d\Omega_p}{(2\pi \hbar)^3} \Rightarrow \frac{V 8\pi p^2 dp}{(2\pi \hbar)^3} \Rightarrow \rho(|p|) = \frac{8\pi p^2}{(2\pi \hbar)^3}. \quad (13.21)$$

◇ Для перехода к распределению по энергиям электронов ($\nu = E$) выразим импульс через энергию, т.е. положим в (13.21) $p = \sqrt{2mE}$; точно так же для распределения по частотам фотонов ($\nu = \omega$) запишем $p = \hbar\omega/c$. Это дает (e — электроны, γ — фотоны)

$$dN_e = \frac{4\pi \sqrt{E} (2m)^{3/2}}{(2\pi \hbar)^3} dE \rightarrow \rho_e(E) = \frac{4\pi \sqrt{E} (2m)^{3/2}}{(2\pi \hbar)^3}; \quad (13.22)$$

$$dN_\gamma = \frac{\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} \rightarrow \rho_\gamma(\omega) = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3}. \quad (13.23)$$

Для небольших энергий влияние взаимодействия может быть большим и форма зависимости $\rho(\nu)$ изменяется.

■ Слабое периодическое внешнее поле.

Рассмотрим переход в непрерывный спектр под действием слабого периодического возмущения (13.10). Поскольку обратные переходы редки, здесь не возникает резонансных условий, и теория возмущений (13.15) работает вне зависимости от частоты внешней силы.

Перепишем ответ (13.15) в другой форме для случая, когда энергия конечного состояния выше энергии начального состояния, т.е. приняв $\omega_{fi} > 0$,

$$a_{fi} = -F_{fi} \frac{e^{i\epsilon t/2} 2i \sin(\epsilon t/2)}{\hbar \epsilon} - F_{fi}^* \frac{e^{iEt/2} 2i \sin(Et/2)}{\hbar E};$$

$$\epsilon = \omega_{fi} - \omega, \quad E = \omega_{fi} + \omega.$$

По общим формулам, вероятность перехода

$$w_{fi} = \int [A_1 + A_2 + A_3] \rho(E_f) dE_f, \quad A_1 = |F_{fi}|^2 \frac{\sin^2(\epsilon t/2)}{(\hbar \epsilon)^2},$$

$$A_2 = 2 \operatorname{Re} (F_{fi}^2 e^{-2i\omega t}) \frac{\sin \epsilon t \sin Et}{\hbar^2 \epsilon \epsilon}, \quad A_3 = |F_{fi}|^2 \frac{\sin^2(Et/2)}{(\hbar E)^2}.$$

С ростом времени t относительные величины слагаемых A_2 и A_3 уменьшаются, а вклад слагаемого A_1 сосредотачивается во всё более узкой области $|\epsilon| \lesssim 1/t$. Скорость перехода (13.15) получается из этой вероятности делением на t и переходом $t \rightarrow \infty$. После этого остаётся только квадрат первого слагаемого и интеграл по области, включающей состояние f , для которого $\omega_{fi} = \omega$:

$$r_{fi} = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{\Delta E_f} \rho(E_f) dE_f \left| \frac{F_{fi}}{\hbar} \right|^2 \frac{4 \sin^2(\epsilon t/2)}{\epsilon^2 t}.$$

Математическая вставка

Рассмотрим выражение

$$f(\alpha) = \lim_{t \rightarrow \infty} f(\alpha, t), \quad f(\alpha, t) = \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t}.$$

Заметим, что

$$f(\alpha, t) \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{если } \alpha \neq 0 \\ t/\pi & \text{если } \alpha \rightarrow 0 \end{cases} \text{ при } t \rightarrow \infty.$$

Кроме того,

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} f(\alpha, t) \phi(\alpha) d\alpha &\equiv \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t} \phi(\alpha) d\alpha = \frac{1}{\pi} \int_{-\epsilon t}^{\epsilon t} \frac{\sin^2 y}{y^2} \phi(y/t) dy \\ &\rightarrow \phi(0) \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 y}{y^2} dy \rightarrow \phi(0). \end{aligned}$$

Последний интеграл, несомненно, сходится. Это - число, которое оказывается равным 1 (так подобран коэффициент). Таким образом, функция $f(\alpha)$ обладает всеми свойствами δ -функции, т.е.

$$f(\alpha) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi \alpha^2 t} = \delta(\alpha). \quad (13.24)$$

Выполняя для r_{fi} предельный переход с помощью полученного соотношения (13.24), найдём скорость перехода

$$\begin{aligned} r_{fi} &= \int_{\Delta E} \rho(E_f) dE_f \left| \frac{F_{fi}}{\hbar} \right|^2 2\pi \delta(\omega_{fi} - \omega) \\ &= \left| \frac{F_{fi}}{\hbar} \right|^2 \cdot 2\pi \hbar \rho(E_f) |_{E_f = E_i + \hbar \omega}. \end{aligned} \quad (13.25)$$

Таким образом, в пределе $t \rightarrow \infty$ должен выполняться закон сохранения энергии. При конечных временах всё более существенными становятся другие значения энергии $E_f \neq E_i + \hbar \omega$. Их характерный разброс увеличивается с уменьшением t в соответствии с соотношением неопределённостей $\Delta E \Delta t > \hbar/2$.

13.6. Испускание и поглощение излучения

Рассмотрим теперь *процессы излучения* электромагнитных волн и их *поглощения*. Последовательное изучение таких процессов составляет предмет квантовой электродинамики.

Ниже мы обойдёмся без детального изучения динамики процесса, воспользовавшись приёмом, найденным мною в курсе Э.Ферми. Мы рассмотрим сначала переходы в поле электромагнитных волн с помощью результатов предыдущего раздела, а потом вычислим вероятность излучения в отсутствие внешнего поля.

• Поле излучения в полости.

Запишем некоторые соотношения для электромагнитных волн в полости — газа фотонов (его тоже иногда называют излучением).

Электромагнитное поле в конечном объеме (например, в металлическом кубе) представляет собой набор стоячих волн. Каждое из этих состояний можно отождествить с некоторым осциллятором, как мы делали это вводя фононы для описания колебаний кристаллической решетки. Мы говорим, что в системе есть $n_{\vec{k}\vec{e}}$ **фотонов** данного вида, если энергия соответствующего осциллятора есть $\hbar\omega(Vn_{\vec{k}\vec{e}} + 1/2)$. Слагаемое $\hbar\omega/2$ описывает "нулевые колебания вакуума", оно отбрасывается с изменением начала отсчета энергии. Записав $V\mathcal{E}^2(\omega)/(8\pi) = \hbar\omega n_{\vec{k}\vec{e}}V$, мы снова приходим к соотношению (13.26).

Для электромагнитной волны с волновым вектором \vec{k} (с частотой $\omega = kc$) и поляризацией \vec{e} энергия соответствующих фотонов есть $\epsilon = \hbar\omega \equiv \hbar kc$, импульс $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Обозначим через $n_{\vec{k}\vec{e}}d\omega$ среднее число таких фотонов в единице объема и через $Ud\omega$ плотность энергии этих волн в интервале частот $d\omega$. Очевидно, эта плотность связана с плотностью числа состояний $\rho(\omega)$ (13.23) соотношением $U(\omega)d\omega = \hbar\omega n_{\vec{k}\vec{e}}\rho(\omega)d\omega$.

Для газа излучения в полости в тепловом равновесии $n_{\vec{k}\vec{e}}$ не зависит от направления векторов \vec{k} и \vec{e} , поэтому

$$U(\omega) = n_{\vec{k}\vec{e}} \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}. \quad (13.26)$$

Та же плотность энергии выражается через амплитуду поля в волне

$$U(\omega)d\omega = \frac{\vec{\mathcal{E}}^2(\omega) + \vec{\mathcal{B}}^2(\omega)}{8\pi} \rho(\omega)d\omega = \frac{\mathcal{E}^2(\omega)}{8\pi} \rho(\omega)d\omega.$$

(Множитель $1/2$ в последнем соотношении возник при усреднении величины $\cos^2(\omega t - \vec{k}\vec{r})$ по времени.)

13.6.1. Коэффициенты Эйнштейна

Рассмотрим атомную систему с двумя дискретными уровнями u и d ($E_d < E_u$). Обозначим через $N(u)$ и $N(d)$ числа атомов в состояниях u и d соответственно. В этой системе переходы $d \rightarrow u$ происходят только под действием внешнего поля (поля излучения), это – вынужденные переходы. В то же время переходы $u \rightarrow d$ могут происходить и под действием поля излучения (вынужденные переходы) и самопроизвольно (спонтанные переходы). Эйнштейн предложил записывать соответствующие скорости переходов (числа переходов в секунду) следующим образом.

Скорость вынужденных переходов $d \rightarrow u$ есть

$$r_{d \rightarrow u} N(d) = B_{du} U(\omega_{ud}) N(d). \quad (13.27a)$$

Скорость переходов $u \rightarrow d$ (вынужденных и спонтанных) есть

$$r_{u \rightarrow d} N(u) = [A_{ud} + B_{ud} U(\omega_{ud})] N(u). \quad (13.27b)$$

Введённые здесь коэффициент поглощения B_{du} , коэффициент вынужденного испускания B_{ud} и коэффициент спонтанного испускания A_{ud} называют коэффициентами Эйнштейна.

Чтобы найти соотношения между этими коэффициентами, выразим плотность энергии через число фотонов газа излучения (13.26) и запишем отношение скоростей переходов в расчёте на один атом:

$$\frac{r_{d \rightarrow u}}{r_{u \rightarrow d}} = \frac{B_{du} \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} n_{\vec{k}\vec{e}}}{A_{ud} + B_{ud} \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} n_{\vec{k}\vec{e}}}. \quad (13.28)$$

В согласии с (4.12), для состояния поля с n фотонами данного типа матричный элемент излучения, т.е. добавления еще одного фотона домножается на $\langle n+1 | \hat{a}^+ | n \rangle \propto \sqrt{n+1}$, а матричный элемент поглощения – на $\langle n-1 | \hat{a} | n \rangle \propto \sqrt{n}$. Поэтому вероятности излучения и поглощения связаны соотношением:

$$\frac{w^{изл}}{w^{пол}} = \frac{r_{u \rightarrow d}}{r_{d \rightarrow u}} = \frac{n+1}{n}.$$

Сравнивая с (13.28), получим *соотношения Эйнштейна*:

$$B_{ud} = B_{du}, \quad A_{ud} = \frac{\hbar \omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot B_{ud}, \quad (13.29)$$

и ниже мы опускаем индексы ud и du у коэффициентов Эйнштейна.

13.6.2. Вероятность излучения

Пусть на рассматриваемую атомную систему падает достаточно длинный пакет волн электромагнитного поля, в среднем поляризованных вдоль оси z , с напряженностью электрического поля \mathcal{E} и с частотой ω . Мы рассмотрим переходы между уровнями u и d атомной системы в поле этого пакета.

Считая нашу систему одноэлектронной, запишем возмущение в виде

$$V(t) = e\mathcal{E}z \cos \omega t.$$

Это — частный случай периодического возмущения (13.10) с $F = e\mathcal{E}z/2$.

Волновой пакет не строго монохроматичен, здесь есть разброс по частотам. Поэтому выражение для скорости переходов в непрерывный спектр (13.25) применимо с минимальными изменениями для описания $u \leftrightarrow d$ переходов в поле этого пакета. В частности, вероятность перехода $d \rightarrow u$ есть (ср. (13.25)):

$$\frac{e^2 \mathcal{E}^2 |z_{ud}|^2}{4\hbar^2} \cdot \frac{4 \sin^2 \left(\frac{\omega_{ud} - \omega}{2} \right) t}{(\omega_{ud} - \omega)^2} dN \Rightarrow \pi t \frac{e^2 \mathcal{E}^2 |z_{ud}|^2}{2\hbar^2} \delta(\omega_{ud} - \omega) \bar{\rho}(\omega) d\omega \frac{d\Omega}{4\pi}.$$

(Здесь $\bar{\rho}(\omega)$ — спектральная плотность для пакета.)

Подставляя сюда $\mathcal{E}^2 = (8\pi)U$, найдем

$$r_{d \rightarrow u} = \frac{4\pi^2 e^2}{\hbar^2} |z_{ud}|^2 \cdot U(\omega_{ud}) \frac{d\Omega}{4\pi}.$$

Зависимость матричного элемента z_{ud} от углов определяется множителем $\cos \theta$. Усреднение по углам для сферически симметричного распределения электрона в атоме дает поэтому множитель $1/3$. Окончательно, получаем скорость переходов с поглощением падающей (вынуждающей) волны на один атом в состоянии d (вероятность вынужденного излучения за единицу времени на один атом):

$$r_{d \rightarrow u} = \frac{4\pi^2 e^2}{3\hbar^2} \langle |\vec{r}_{ud}|^2 \rangle \cdot U(\omega_{ud}). \quad (13.30)$$

Используя теперь (13.26) и (13.29), получим вероятность спонтанного излучения за единицу времени и интенсивность этого излучения $I(\omega)$ — среднюю энергию, излучаемую за секунду (последнее выражение практически совпадает с результатом классической электродинамики):

$$r^{спонт} = \frac{4e^2 \omega^3}{3\hbar c^3} \langle |\vec{r}_{ud}|^2 \rangle; \quad I(\omega) = r^{спонт} \hbar \omega = \frac{4e^2 \omega^4}{3c^3} \langle |\vec{r}_{ud}|^2 \rangle. \quad (13.31)$$

(Для многоэлектронной системы $e\vec{r}_{ud}$ переходит в матричный элемент дипольного момента $\sum e_i \vec{r}_{i,ud} = \vec{d}_{ud}$.)

13.6.3. Правила отбора для излучения

Мы рассматривали взаимодействие внешнего поля с электрическим дипольным моментом атома. В ответ входят матричные элементы, отвечающие электрическим дипольным переходам в атомной системе. Такие

переходы возможны не между любыми состояниями. Набор неисчезающих матричных элементов даётся правилами отбора для векторных операторов (разд. 10.2.1).

Если состояние $|d\rangle$ есть $|n\ell m\rangle$, а состояние $|u\rangle = |n'\ell'm'\rangle$, то (с учетом правил сложения моментов и сохранения чётности) должно быть

$$\ell' - \ell = \pm 1, 0 \quad m' - m = \pm 1, 0, \quad (13.32)$$

чётность состояния должна меняться на 1.

Эти правила отбора можно понимать также как следствие того, что фотон – это частица со спином 1.

◇ Мы рассмотрели выше электрическое дипольное излучение. Возможны также переходы, для которых эти правила отбора не выполняются, они называются *запрещёнными*, поскольку их вероятности значительно меньше вероятностей электрического дипольного излучения. Амплитуда магнитно–дипольного излучения в $v/c \sim \alpha$ раз меньше, т.е. его вероятность меньше в α^2 раз. Вероятность квадрупольного излучения меньше вероятности дипольного излучения в $(a_B/\lambda)^2$ раз, где длина волны $\lambda = 2\pi c/\omega$. Для атома водорода $(a_B/\lambda) = \alpha/8\pi \sim 10^{-3}$. При этом для магнитно–дипольных переходов и квадрупольных переходов чётность сохраняется, а для квадрупольных переходов к тому же может быть $\Delta\ell = \pm 2$.

13.6.4. Собственная ширина уровня

Рассматривая атомные системы до сих пор, мы учитывали только (кулоновские по происхождению) взаимодействия электронов и ядер друг с другом. Это привело нас к концепции стационарных уровней энергии этих систем. Учёт запаздывания фактически вводит дополнительное взаимодействие с электромагнитным полем вне ядер и электронов. Это взаимодействие ничтожным образом смещает уровни энергии. Более важно, что при этом уровни перестают быть в точности стационарными, в этом приближении необходимо учитывать возможность спонтанного перехода с верхнего уровня u на один из нижних d с одновременным излучением фотона частоты ω_{ud} . Скорость этих переходов описывается соотношением (13.31). Полная скорость уходов с уровня u даётся суммированием по всем нижележащим уровням d , она связана с временем жизни τ и

собственной шириной уровня Γ соотношениями:

$$r_u = \sum_d r_{ud}, \quad \tau = \frac{1}{r_u}, \quad \Gamma = \frac{\hbar \text{bar}}{\tau} \equiv \hbar \cdot r_u. \quad (13.33)$$

Рассмотрим для примера скорость перехода, время жизни и собственную ширину для состояния $|k+1, \ell = k, m\rangle$ атома водорода. Согласно правилам отбора, возможен только переход $|k+1, \ell = k, m\rangle \rightarrow |k, \ell = k-1, m\rangle$. Вместо полного вычисления мы получим грубую оценку, справедливую при $k \gg 1$.

Энергии рассматриваемых состояний $E_u = -R_y/(k+1)^2$ и $E_d = -R_y/k^2$, поэтому $\omega_{ud} = R_y(2k+1)/\hbar k^2(k+1)^2 \approx 2R_y/\hbar k^3$. Матричный элемент z_{ud} близок к радиусу соответствующей орбиты $a_B k^2$. Поэтому в соответствии с (13.31) время жизни и собственная ширина уровня составляют

$$\tau \sim \frac{\hbar c^3}{4e^2 \omega^3 a_B^2 k^4} \sim \frac{\hbar}{R_y} \left(\frac{\hbar c}{e^2} \right)^3 \left(\frac{e^2}{2a_B R_y} \right)^2 \frac{k^5}{8} = \frac{\hbar}{R_y} \frac{k^5}{8\alpha^3},$$

$$\frac{\Gamma}{\hbar \omega_{mn}} \approx \frac{4\alpha^3}{k^2}.$$

Подстановка чисел дает $\tau \approx 2 \cdot 10^{-12} k^5$ с, $\Gamma/(\hbar \omega_{mn}) \approx 10^{-6}/k^2$.

Время жизни уменьшается, а собственная ширина увеличивается для состояний $|k+1, \ell(k, m)\rangle$, поскольку для них становятся возможными переходы на несколько ниже лежащих уровнях (см. задачу 11).

13.7. Принципы работы лазеров

Рассмотрим тело, чьи атомы (или молекулы) имеют возбужденные состояния u с запрещённым переходом в основное состояние d и с кратностями вырождения этих состояний g_u и g_d . Обозначим через $N(u)$ и $N(d)$ числа атомов в этих состояниях (*заселённости*), и через $E_{ud} = \hbar \omega_{ud}$ – энергию возбуждения (разность энергий уровней). В термодинамическом равновесии заселённость верхнего уровня меньше, чем нижнего, $N(u)/N(d) = (g_u/g_d)e^{-E_{ud}/kT}$ (распределение Больцмана).

Пусть нам удалось создать *инверсную заселённость* $N(u) > N(d)$ (один из способов ее создания мы обсудим далее). Поскольку переход $u \rightarrow d$ запрещен, система может довольно долго оставаться в этом состоянии (состояние с отрицательной температурой – см. 2 часть курса).

Направим по этому телу луч света (пучок фотонов) с частотой ω_{ud} . Под действием поля этих фотонов к очень маловероятному (запрещенному) спонтанному излучению добавится вынужденное излучение, которое усиливается по мере прохождения вещества, поскольку к первоначальным фотонам пучка будут добавляться все новые и новые излученные фотоны. Если это тело представляет собой сплошной цилиндр, ограниченный параллельными зеркалами, то в соответствии с (13.27b), при обратном прохождении света сигнал усилится еще сильнее и т.д., до тех пор пока инверсная заселенность не ликвидируется. Такую систему и называют лазером (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation). Как и другие подобные системы, лазер может работать и в режиме усилителя (с внешним возбуждением) и в режиме генератора (когда он возбуждается фотонами от спонтанного перехода).

По механизму рождения ясно, что получившееся излучение когерентно и имеет очень малую угловую расходимость (фотоны, летящие под углом, вылетают наружу и не воспроизводятся; фотоны рождаются когерентно с "родителями"). Это излучение обычно поляризовано.

Один из распространенных способов создания инверсной заселенности это – оптическая накачка. Она возможна, если в наших атомах в дополнение к паре уровней d и u существует еще один вышележащий уровень h ($E_h > E_u > E_d$), причем переходы $h \rightarrow u$, $h \rightarrow d$ – разрешенные. Для накачки система освещается интенсивным источником немонахроматического света, среди характерных частот которого есть и ω_{hd} . Забудем на минуту о существовании уровня u . Тогда под воздействием нашего света средние заселенности уровней h и d практически сравниваются (чтобы обеспечить равенство числа переходов сверху вниз и снизу вверх; спонтанными переходами можно пренебречь по сравнению с вынужденными). Наличие уровня u резко меняет дело. После возбуждения уровня h последний быстро излучает – либо в состояние d , либо в состояние u . Но с состоянием d происходит непрерывный обмен, а состояние u оказывается "могилой", в которой атомы остаются долго, поскольку излучение из этого состояния запрещено. Со временем в это состояние переходит все больше атомов, а заселенности состояний d и h становятся все меньше – создается необходимая нам инверсная заселенность.

13.8. Задачи

1. Частица находится в поле $V = -G\delta(x)$. Волновая функция $\psi(x, t = 0) = e^{-|x|/b}/\sqrt{2b}$. Найти вероятность того, что при $t \rightarrow \infty$ частица окажется в связанном состоянии.
2. Атом трития (водород с ядром, втрое более тяжёлым, чем протон H^3) находится в основном состоянии. В атомном масштабе времени β – распад ядра ($H^3 \rightarrow He^3 + e + \bar{\nu}$) происходит мгновенно. Чаще всего энергия электрона значительно больше атомной. Поэтому получившиеся электрон и антинейтрино улетают, практически не взаимодействуя с атомным электроном, а ядро превращается в ядро He^3 . Пренебрегая отдачей ядра, определить вероятность того, что получившийся водородоподобный атом He^+ • останется в основном состоянии; • перейдёт на n -ый уровень. Оценить поправку на отдачу ядра для перехода в основное состояние (дать численные оценки).
3. Найти вероятности переходов из n -го состояния бесконечно глубокой прямоугольной ямы и осциллятора под действием возмущения $V(x, t) = -eExf(t)$ для случаев •(a) $f(t) = e^{-(t/\tau)^2}$ при $t_0 = -\infty$, •(b); $f(t) = \frac{\tau^2}{\tau^2 + t^2}$ при $t_0 = -\infty$, •(c) $f(t) = 1 - e^{-t/\tau}$ при $t_0 = 0$.
4. Найти амплитуду перехода $a_{m,n}^{(2)}$ во втором порядке теории возмущений, вслед за (13.7).
5. Найти амплитуду перехода из основного состояния в другие состояния при расширении бесконечной прямоугольной ямы а) медленном; б) мгновенном. Каковы условия применимости теории возмущений.
6. Частица находилась в связанном состоянии в поле $V = -G_0\delta(x)$. В момент времени $t = 0$ яма внезапно углубилась $G_0 \rightarrow G_1 = G_0 + \Delta G$. Найти вероятность того, что частица останется в яме. Найти распределение по импульсам улетевших частиц.
7. Плоский ротатор находится в состоянии с определенным значением $L_z = \hbar m$. Найти вероятности различных значений L_z под действием электрического поля $\mathcal{E}_z = f(t)\mathcal{E}_0$.
8. Вычислить вероятности переходов из основного состояния в возбужденные для бесконечной потенциальной ямы ширины $2a$ под действием возмущений $V = (Fx + Bx \cos \omega t)e^{-t/T}\theta(t)$ и $V = \left(Fx + Bxe^{-t/T} \cos(\omega t)\right)\theta(t)$.

9. На заряженный осциллятор, находящийся в основном состоянии накладывается однородное электрическое поле

$$\mathcal{E}(t) = \begin{cases} \mathcal{E}_0 e^{-|t|/\tau} & \text{при } t_0 = -\infty \quad (a) \\ \mathcal{E}_0(1 - e^{t/\tau}) & \text{при } t_0 = 0 \quad (b). \end{cases}$$

Найти вероятности возбуждения различных состояний осциллятора в первом порядке теории возмущений.

10. Найти собственную (радиационную) ширину 1-го возбужденного уровня заряженного трехмерного осциллятора $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + m\omega^2 x^2/2$.
11. Найти собственную (радиационную) ширину для состояний $|2, 1, 0\rangle$, $|3, 1, 0\rangle$ и $|n\ell = n - 1, m\rangle$ для атома водорода. Сравнить ее с Доплеровской шириной при комнатной температуре.

Ответ для $n=2$:
$$\frac{\Gamma}{\hbar\omega_{2,1}} = \frac{2^{11}}{3^9} \alpha^3 \approx 3 \cdot 10^{-8} \text{ с.}$$

12. На атом водорода, находящийся при $t = 0$ в основном состоянии, действует однородное электрическое поле $\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 \sin \omega t$. Вычислить вероятность ионизации в единицу времени в низшем порядке теории возмущений (электрон в конечном состоянии считать свободным).
13. Описать поведение системы, в которой две частоты перехода близки к частоте возмущения, (наподобие описания в разд. 13.4).

14. Для одномерной ямы $U = \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0, \\ 0 & \text{при } 0 < x < a; x > b, \\ U_0(1 - x/b) & \text{при } b > x > a. \end{cases}$

найти время жизни n -го состояния в квазиклассическом приближении; считать b/a большим.

Глава 14

РАССЕЯНИЕ

14.1. Постановка задачи. Общие соотношения

14.1.1. Амплитуда рассеяния. Сечение рассеяния

В задаче рассеяния рассматриваются две частицы, первоначально удалённые друг от друга на большое расстояние. По этому известному начальному состоянию требуется определить возможные конечные состояния и вероятности перехода в каждое из них. К сожалению, решение одномерной задачи рассеяния (разд. 2.6) содержит слишком много специфических деталей, и мы не можем прямо распространить эти выводы на реальный трёхмерный случай. Как известно (см. разд. 8.1), проблема столкновения двух тел, взаимодействие которых описывается потенциалом $V(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, сводится к задаче о движении одной частицы в поле $V(\mathbf{r})$, создаваемом некоторой (бесконечно тяжелой) мишенью.

В силу принципа суперпозиции, за начальное состояние можно принять волну любого вида. Стандартный выбор, апеллирующий к простоте интерпретации, состоит в выборе начального состояния в виде стационарной плоской волны частиц с импульсом $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \equiv \hbar(0, 0, k)$ (с неизменным потоком падающих частиц, движущихся из бесконечности).

• Рассмотрим подробно *упругое рассеяние*, т.е. случай, когда взаимодействие с рассеивателем порождает расходящуюся сферическую волну, в которой импульсы частиц \mathbf{p}' направлены по радиусу от центра:

$$\mathbf{p} \equiv \hbar\mathbf{k} = (0, 0, \hbar k); \quad \mathbf{p}' \equiv \hbar\mathbf{k}' = \hbar k \frac{\mathbf{r}}{r}; \quad E = \frac{p^2}{2m}; \quad \lambda = \frac{1}{k}. \quad (14.1)$$

Угол между направлениями \mathbf{p} и \mathbf{p}' называют *углом рассеяния* θ .

В нашей стационарной задаче искомые вероятности переходов представляют собой отношения потоков рассеянных частиц к потоку падающих частиц.

Обозначим через a размер области, где существенно отличие потенциала взаимодействия $V(r)$ от нуля¹. Вдали от рассеивателя $r \gg a, \lambda$ волновая функция должна быть суперпозицией падающей плоской волны e^{ikz} и рассеянной расходящейся сферической волны:

$$\psi = \psi_{nad} + \psi_{рас} = e^{ikz} + f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \cdot \frac{e^{ikr}}{r} \text{ при } r \gg a, \lambda. \quad (14.2)$$

Это соотношение можно рассматривать как граничное условие для уравнения Шредингера

$$(\Delta + k^2)\psi(\mathbf{r}) = (2m/\hbar^2)V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}), \quad (14.3)$$

подобное условию (падающая волна + отражённая волна слева, прошедшая волна справа) для одномерной задачи рассеяния.

Введённую в (14.2) величину $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ называют **амплитудой рассеяния**. Её исследование — основная задача теории рассеяния. (Нередко мы пишем $f(k, \theta)$ вместо $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$.)

■ Поток вероятности и сечение.

Вычислим поток вероятности на больших расстояниях, где справедлива асимптотика (14.2):

$$\mathbf{j} = \frac{i\hbar}{2m}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) = \mathbf{j}_{nad} + \mathbf{j}_{интерф} + \mathbf{j}_{рас}. \quad (14.4a)$$

Учитывая, что $\vec{\nabla} e^{ikz} = i\vec{k} e^{ikz}$ и $\vec{\nabla} [e^{ik'r}/r] = [i\vec{k}' - \frac{\vec{r}}{r^3}] [e^{ik'r}/r]$, найдём

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{nad} &= \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} - \text{поток падающих частиц,} \\ \mathbf{j}_{рас} &= \frac{\hbar \mathbf{k}'}{mr^2} |f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 - \text{поток рассеянных частиц,} \\ \mathbf{j}_{интерф} &= \frac{\hbar}{2mr} (\mathbf{k} + \mathbf{k}') [f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - kr)} + f^*(\mathbf{k}, \mathbf{k}') e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - kr)}] - \\ &\quad \text{интерференционный поток.} \end{aligned} \quad (14.4b)$$

В третьем выражении отброшены слагаемые, убывающие с ростом расстояния быстрее выписанного.

◆ *Полный поток, рассеянный в телесный угол $d\Omega$ (не включающий $\theta=0$), есть*

$$dJ_{рас} = j_{рас} r^2 d\Omega = (\hbar k/m) |f|^2 d\Omega.$$

¹Этот размер задается формой взаимодействия. Для ядерных сил $V(r) \sim e^{-r/a}/r$ с $a \sim 10^{-13}$ см.

Его отношение к плотности потока падающих частиц называют **дифференциальным сечением упругого рассеяния**:

$$d\sigma_{упр} = \frac{dJ_{рас}}{j_{пад}} \equiv |f|^2 d\Omega. \quad (14.5)$$

Соответственно полное **сечение упругого рассеяния** есть:

$$\sigma_{упр} = \int d\sigma_{упр} = \int |f|^2 d\Omega. \quad (14.6)$$

Очень часто рассеяние бывает чисто упругим, тогда эпитет "упругое" при описании сечений отбрасывают.

∇ В задачах статистической физики рассеяние часто характеризуется величиной *транспортного сечения*

$$\sigma_{tr} = \int (1 - \cos \theta) d\sigma. \quad (14.7)$$

• Нередко часть падающих частиц после столкновения с рассеивателем меняет свою энергию или исчезает (при рассеянии электрона на атоме последний может перейти в возбуждённое состояние, позаимствовав энергию у электрона; при столкновении с ионом электрон может поглотиться с образованием атома и испусканием фотона,...). В стационарном режиме поглощенные частицы не копятя в рассеивателе, потоки этих "переродившихся" частиц – также расходящиеся волны, подобные (упругой) рассеянной волне. В таком случае величины, подобные (14.6) называют **сечениями неупругих каналов реакции**, их сумма и составляет сечение неупругого рассеяния $\sigma_{неупр}$. **Полное сечение** – это сумма

$$\sigma_{tot} = \sigma_{упр} + \sigma_{неупр}. \quad (14.8)$$

◆ В полный интерференционный поток $J_{интерф} = \oint \mathbf{j}_{интерф} d\mathbf{S}$ входит только амплитуда упругого рассеяния (остальные состояния отличаются от исходного). Подставим в этот интеграл определение (14.4b) и равенство $dS = r^2 d \cos \theta d\phi$:

$$J_{интерф} = \frac{\hbar k}{2m} \int (1 + \cos \theta) [f(k, \theta) e^{-i(\mathbf{kr} - kr)} + f^*(k, \theta) e^{i(\mathbf{kr} - kr)}] r dr d \cos \theta d\phi.$$

Выполним теперь тривиальное интегрирование по $d\phi$ и замену $x = \cos \theta$.

Математическая вставка

Рассмотрим при $r \rightarrow \infty$ интеграл

$$J = \int_{-1}^1 e^{ikrx} g(x) dx. \quad (14.9a)$$

Проинтегрируем его по частям:

$$J = (1/ikr) e^{ikrx} g(x) \Big|_{-1}^1 - (1/ikr) \int_{-1}^1 e^{ikrx} g'(x) dx.$$

Повторение этой процедуры дает ряд по $1/r$. При больших r в этом ряду достаточно удерживать только первый член, что дает:

$$J = (1/ikr) [e^{ikr} g(1) - e^{-ikr} g(-1)]. \quad (14.9b)$$

Применяя полученный результат к функции $J_{интерф}$, для которой $g(\cos \theta) = f(k, \theta)(\cos \theta + 1)$, получим

$$\begin{aligned} J_{интерф} &= \frac{2\pi\hbar}{im} (f^*(k, \theta = 0) - f(k, \theta = 0)) \Rightarrow \\ J_{инт} &= -(4\pi\hbar/m) Im f(k, 0). \end{aligned} \quad (14.10)$$

■ * Описание потоков частиц плоскими волнами – это, конечно, приближение. В действительности потоки частиц образуют волновые пакеты (1.2), и физические амплитуды рассеяния представляют собой свёртки обсуждавшихся выше монохроматических амплитуд с амплитудами волновых пакетов $A(\vec{k})$. В большинстве случаев интервал усреднения волнового пакета меньше, чем масштаб изменения амплитуды рассеяния, и эта "пакетность" не вносит ничего нового. Однако, иногда реализуются и противоположные ситуации. В этих случаях понятие сечения рассеяния неприменимо, наблюдаемые величины зависят от соотношения между распределением частиц в сталкивающихся сгустках и характерными длинами их волн. Ниже мы не рассматриваем эту возможность.

14.1.2. Оптическая теорема

■ Рассеяние – стационарный процесс без накопления чего-нибудь в рассеивающем центре. Поэтому должно иметь место сохранение вероятности: в случае *упругого рассеяния* число выходящих за секунду частиц должно совпадать с числом входящих частиц, а в случае *неупругого рассеяния* разумным образом рассчитанный полный расход частиц также должен совпадать с полным приходом.

Проинтегрируем полный поток j (14.4b) по поверхности сферы большого радиуса, включив сюда и потоки частиц в других конечных состояниях. Источников при конечных r нет, поэтому должно быть $\oint \mathbf{j} d\mathbf{S} = \int \text{div} \mathbf{j} dV = 0$. Вклад падающего потока в этот интеграл обращается в нуль. Следовательно, должно быть

$$\oint \mathbf{j} d\mathbf{S} \equiv 0 \Rightarrow J_{\text{интерф}} + J_{\text{рас}} = 0.$$

Подставим сюда полученное выражение $J_{\text{интерф}}$ (14.10). В $J_{\text{рас}}$ следует учесть потоки частиц во всех конечных состояниях, т.е. $J_{\text{рас}} = (\hbar k/m)\sigma_{\text{tot}}$. В итоге получается **оптическая теорема** – важнейшее *следствие сохранения вероятности*:

$$\text{Im} f_{el}(k, 0) = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\text{tot}}. \quad (14.11)$$

(Значок el напоминает, что слева стоит амплитуда упругого рассеяния.)

Иными словами, интерференция падающей волны с волной, рассеянной на нулевой угол ("прошедшей через рассеиватель"), уменьшает поток частиц, летящих вперед. Это обеспечивает сохранение вероятности – в полной аналогии с уравнением сохранения вероятности в одномерном случае (2.25). В частности, рассеяние не может быть чисто неупругим.

При рассеянии частиц очень высокой энергии рождается много новых частиц, наблюдать их все в каждом случае практически невозможно. Поэтому не удаётся прямо измерить полное сечение. В этом случае нередко оказывает помощь оптическая теорема. Для упругого рассеяния удаётся определить амплитуду рассеяния на угол ноль, и отсюда с помощью (14.11) находят полное сечение.

◆ *Особенности рассеяния частиц со спином.*

При рассеянии частиц со спином все амплитуды и сечения зависят еще и от спинов. Число отличных от нуля спиновых амплитуд определяется законом сохранения момента. В частности, для рассеяния вперед (в системе центра масс) сохраняется проекция спина на импульс (спиральность). Так, для рассеяния электрона на протоне (спины $1/2$) эти проекции λ_e и λ_p могут быть равны $\pm 1/2$ (\pm) и полная спиральность есть $\lambda \equiv \lambda_e - \lambda_p$. Для рассеяния вперед отличны от нуля только амплитуды $f_{+,+\rightarrow+,+} \equiv f_{-,-\rightarrow-,-}$, $f_{+,+\rightarrow-,-} \equiv f_{-,-\rightarrow+,+}$ ($\lambda = 0$) и $f_{+,-\rightarrow+,-} \equiv f_{-,-\rightarrow-,-}$ ($\lambda = \pm 1$). Равенства между амплитудами с противоположными спиральностями следуют из сохранения чётности. Наличие

переходов $(+, +) \rightarrow (-, -)$ означает, что рассеянный вперед электрон может изменить свою поляризацию.

Если сечение рассеяния мало, то слой рассеивателей практически прозрачен для падающих частиц (как Земля для потока нейтрино). При этом, однако амплитуда рассеяния не настолько мала и вычисление, подобное тому, что привело нас к оптической теореме, показывает, что интерференция падающей волны с рассеянной на поляризованной мишени, различная для разных переходов, может привести к перераспределению прошедших частиц по поляризациям (как в прозрачной среде с двоякопреломлением) при сохранении полного их числа. Такое явление имеет место при прохождении поляризованных фотонов большой энергии через достаточно плотный поляризованный лазерный сгусток, фотоны которого в этом случае можно считать мишенями (Г.Л. Коткин, В.Г. Сербо).

14.1.3. Уравнение Шредингера в интегральной форме

От дифференциального уравнения Шредингера (14.3) полезно перейти к интегральному уравнению. Для этого запишем (14.3) в виде неоднородного уравнения $\Delta\psi + k^2\psi = \Phi(r)$, где $\Phi(r) = (2m/\hbar^2)V(r)\psi(r)$. Используя далее известную функцию Грина для оператора $\Delta + k^2$ и граничное условие (14.2), запишем решение в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - (1/4\pi) \int d^3r' \Phi(\mathbf{r}') \frac{e^{ik|bfr-r'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}.$$

Подставляя сюда выражение для $\Phi(r)$, находим интегральную форму уравнения Шредингера

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}) = e^{ikz} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' \frac{V(\mathbf{r}') e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \psi(\mathbf{r}').} \quad (14.12)$$

При $r \gg a$ отличаем $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ от r в знаменателе можно пренебречь. Для показателя экспоненты выпишем более аккуратное разложение и с учетом (14.1) найдем

$$k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = k\sqrt{\mathbf{r}^2 - 2bfr r' + \mathbf{r}'^2} \simeq k(r - \mathbf{r}\mathbf{r}'/r) = kr - \mathbf{k}'\mathbf{r}'.$$

В итоге уравнение (14.12) переходит в соотношение (14.2) с

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r' e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}'). \quad (14.13)$$

◇ Далее для упрощения выкладок мы считаем всюду поле $V(r)$ сферически симметричным.

14.2. Борновское приближение

При решении задачи рассеяния часто используют *борновскую теорию возмущений*. В этой теории потенциальная энергия рассматривается как возмущение. Если в общем случае теории возмущений, разд. 5.2, в качестве невозмущённой задачи можно было *выбирать* любую точно решаемую задачу (невзирая на погрешности в определении параметров базового гамильтониана), то в задаче рассеяния за невозмущённую следует принимать только задачу о свободном движении, которая почти всегда реализуется на достаточно больших расстояниях от рассеивателя. Этот подход кажется естественным, если потенциал достаточно быстро убывает с расстоянием. При этом среднее значение потенциала по всему пространству обращается в нуль, в то время как среднее значение полной энергии совпадает со значением кинетической энергии частицы на бесконечности. Разумеется, это – грубые соображения, реальный критерий применимости борновского приближения обсуждается ниже.

Формально борновская теория возмущений подобна теории возмущений для стационарных состояний, разд. 5.2, она отвечает следующей последовательности действий.

Положим $V \rightarrow \varepsilon V$ и разложим волновую функцию в ряд по ε

$$\psi = \psi^{(0)} + \varepsilon\psi^{(1)} + \dots + \varepsilon^k\psi^{(k)} + \dots, \quad \psi^{(0)} = e^{ikz}. \quad (14.14)$$

Затем в уравнениях (14.3) (или (14.12)) приравняем вклады с одинаковыми степенями ε , и последовательно определим $\psi^{(1)}$, $\psi^{(2)}$, ... и соответствующие вклады в амплитуду рассеяния (14.13), а в конце перейдём к пределу $\varepsilon \rightarrow 1$.

• Чтобы получить амплитуду рассеяния в первом порядке (*часто – просто борновское приближение*), достаточно подставить под интеграл (14.13) вместо $\psi(\vec{r})$ невозмущённую волновую функцию $\psi^{(0)} = e^{ikz} \equiv e^{i\vec{k}\vec{r}}$. Полученная амплитуда представляет собой Фурье-образ потенциала (с точностью до множителя) и зависит только от *импульса передачи* $\hbar\vec{q}$:

$$f(\vec{k}, \vec{k}') \equiv f(q) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d^3r e^{-i\vec{q}\vec{r}} V(\vec{r}), \quad (14.15a)$$

$$\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}, \quad q = 2k \sin(\theta/2).$$

Переход к полярным координатам и интегрирование по углам дают

$$f(q) = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty V(r) \sin(qr) r dr. \quad (14.15b)$$

Полученные соотношения показывают, что изучение амплитуды рассеяния с импульсом передачи $\hbar q$ позволяет рассмотреть детали строения потенциала на расстояниях $r \sim 1/q$.

◆ Обсудим картину рассеяния, как она выглядит в этом приближении.

◇ При небольших энергиях (медленные частицы), ($ka \ll 1$) изменение фазы в области рассеивателя несущественно, под интегралом (14.15) можно положить $e^{iqr} \approx 1$ (или $\sin(qr) \approx qr$), и мы видим, что амплитуда не зависит от угла (угловое распределение изотропно), $f(q) = f_0 \equiv -(8m/\hbar^2) \int V(r)r^2 dr$.

◇ При больших энергиях (быстрые частицы), ($ka \gg 1$) и малых углах рассеяния (малых передачах) $qa \equiv 2ka \sin(\theta/2) < 1$ амплитуда имеет примерно то же значение f_0 , что и для медленных частиц. С ростом угла θ (импульса передачи q) осциллирующие экспоненты e^{iqr} (или синуса $\sin(qr)$) под интегралами (14.15) гасят друг друга, и амплитуда быстро убывает. Таким образом, угловое распределение имеет пик шириной $\theta \sim 1/(ka)$ вблизи направления вперед и быстро убывает с ростом угла рассеяния.

◆ Борновское приближение хорошо описывает рассеяние, если вклад поправки $\psi^{(1)}$ в амплитуду значительно меньше вклада невозмущенной функции $\psi^{(0)}$, или – что то же – в области действия потенциала

$$|\psi^{(1)}| \ll |\psi^{(0)}| \quad \text{при } r < a. \quad (14.16)$$

Для конкретизации этой оценки мы будем считать, что потенциал $V(r)$ сосредоточен в области $r < a$ и исчезает при $r \geq a$, его характерное значение в области $r < a$ мы обозначаем через \bar{V} .

Мы разберём отдельно случаи медленных и быстрых частиц.

◇ Пусть импульс налетающей частицы невелик, так что ее длина волны больше характерных размеров рассеивателя $ka \ll 1$. В этом случае мы определим $\psi^{(1)}$ из интегрального уравнения (14.12). В области действия потенциала все экспоненты e^{ikz} , $e^{ik|r-r'|}$ можно положить равными 1, и интеграл в выражении для $\psi^{(1)}$ есть $\sim 2\pi a^2 \bar{V}$. При этом условие применимости приближения (14.16) принимает вид $[m/(2\pi\hbar^2)]2\pi a^2 |\bar{V}| \ll 1$, т.е. $|\bar{V}| \ll E_{char} = \hbar^2/2ma^2$ – среднее значение потенциальной энергии меньше кинетической энергии, обусловленной локализацией внутри размера a . Напомним, что это условие совпадает с условием отсутствия уровней (8.4) в поле притяжения.

◇ Пусть теперь $ka \gg 1$ (частица быстро "проходит через рассеиватель"). В этом случае функцию $\psi^{(1)}$ удобно оценить уже с помощью дифференциального уравнения (14.3) $(\Delta + k^2)\psi^{(1)} = (2mV(r)/\hbar^2)e^{ikz}$. Его ре-

шение удобно искать в виде $\psi^{(1)} = ge^{ikz}$. Для функции g это уравнение принимает вид $\Delta g + 2ik(\partial g/\partial z) = 2mV/\hbar^2$. По условию, k – большая величина. Поэтому в левой части достаточно удержать только второе слагаемое, тогда наше уравнение легко решается, $\psi^{(1)} = -e^{ikz}(im/k\hbar^2) \int U dz \sim -e^{ikz}(im/k\hbar^2)\bar{V}a$. При этом условие применимости приближения (14.16) принимает вид $\bar{V} \ll \hbar v/a$, где скорость падающей частицы $v = \hbar k/m$. Иными словами, при больших переданных импульсах борновское приближение применимо, если неопределенность в энергии, связанная с конечностью времени пролета, больше энергии взаимодействия².

◇ Итак, критерий применимости борновского приближения есть

$$|V(a)| \ll \begin{cases} \hbar^2/(ma^2) & \text{при } qa \ll 1, \\ \hbar v/a & \text{при } ka > qa \gg 1. \end{cases} \quad (14.17)$$

Подчеркнём, что типичной является ситуация, когда при больших энергиях борновское приближение справедливо для больших углов рассеяния и несправедливо при малых углах рассеяния.

• Заметим, наконец, что в первом борновском приближении амплитуда рассеяния (14.15b) действительна. Это означает, в частности, что в этом приближении оптическая теорема не имеет смысла.

Напомним, что амплитуда в первом борновском приближении $\propto \varepsilon$. Следовательно, сечение, стоящее в правой части (14.11) $\propto \varepsilon^2$. Таким образом, для проверки оптической теоремы необходимо вычислить амплитуду по крайней мере во втором порядке по ε^2 , т.е. во втором борновском приближении.

14.2.1. Конечность полного сечения

• Напомним сначала смысл понятия сечения рассеяния в классической теории. Пусть на рассеивающий центр падает из бесконечности поток частиц. Пусть частицы, имеющие прицельный параметр ρ (момент импульса $L = mv\rho$), рассеиваются на угол $\theta = \theta_{\text{кл}}$. Дифференциальное сечение рассеяния $(d\sigma/d\theta) \sin\theta d\theta = 2\pi\rho d\rho$, а полное сечение $\sigma = \int d\sigma = 2\pi \int \rho d\rho$. (В сущности, это определение и было воспроизведено в квантовом случае выше.) Такое определение означает, что полное сечение есть площадь той окружности в плоскости прицельных

² Помимо того, условие $ka \gg 1$ обеспечивает ещё и применимость квазиклассического рассмотрения даже если величина $V(a)$ не мала по сравнению с E_{char} .

параметров, в которой частица испытывает *хоть какое-то* рассеяние. В большинстве классических задач мы имеем дело с полями, вызывающими отклонение (хотя бы и очень небольшое) на сколь угодно больших расстояниях от рассеивателя, и полные сечения расходятся.

Полезно оценить зависимость $\theta_{\text{кл}}(\rho)$ при больших ρ , когда действующая на частицу сила невелика. При этом движение частицы – почти прямолинейное. Тогда продольный импульс частицы $p \equiv p_z$ можно считать неизменным, а поперечный импульс p_{\perp} определяется из второго закона Ньютона через поперечную компоненту силы $dp_{\perp}/dt = -dV(r)/dr \cdot (\rho/r)$. Далее, $dt = dz/v$. Подставляя, находим приобретённый поперечный импульс и классический угол отклонения

$$\begin{aligned} p_{\perp\text{кл}} &= -\frac{\rho}{v} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \sim \frac{1}{v} V(\rho) \\ \Rightarrow \theta_{\text{кл}} &= \frac{p_{\perp}}{p} \sim \frac{V(\rho)}{pv} \sim \frac{V(\rho)}{E}. \end{aligned} \quad (14.18)$$

• В квантовом случае угол рассеяния, отвечающий прицельному параметру ρ , имеет неопределённость, доставляемую соотношением неопределённостей θ_{quant} . Соответствующая неопределённость поперечного импульса $\Delta p_{\perp} \geq \hbar/\Delta r_{\perp} > \hbar/\rho$, и квантовая неопределённость угла отклонения есть $\theta_{\text{quant}} \sim \Delta p_{\perp}/p_z > (\hbar/\rho p)$.

Пусть поле убывает с расстоянием быстрее, чем $1/r$ при $r \rightarrow \infty$, т.е.

$$rV(r) \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow \infty. \quad (14.19)$$

(Это справедливо для ядерных сил, а также и для электростатического взаимодействия, если рассеиватель электрически нейтрален – атом или молекула.) В этом случае при больших ρ , начиная с некоторого ρ_0 , классический угол рассеяния становится меньше квантовой неопределённости этого угла $\theta_{\text{quant}} > \theta_{\text{кл}}$. *При этом рассеяние заметить невозможно.* Поэтому **полное сечение $\sigma \lesssim \pi\rho_0^2$, т.е. конечно.**

◆ *Оценим* еще поведение амплитуды для малых углов рассеяния в случае, когда $V(r) \propto r^{-n}$ при $r \rightarrow \infty$. Для больших q применимо борновское приближение, и из (14.15а) получается $f(q) \propto q^{n-3} \propto \theta^{n-3}$. Отсюда видно, что дифференциальное сечение конечно при $\theta \rightarrow 0$, если $n \geq 3$, а полное сечение конечно при $n > 2$.

14.2.2. Рассеяние на потенциале Юкавы

Для многих физических задач зависимость потенциальной энергии от расстояния имеет вид

$$V(r) = g \frac{e^{-\mu r}}{r}. \quad (14.20)$$

Такой вид имеет, например, затравочное ядерное взаимодействие (*потенциал Юкавы*), когда $\hbar\mu/c^2$ есть масса частицы – переносчика ядерных взаимодействий (π мезона) и $1/\mu$ – радиус действия сил. Такой вид имеет и поле точечного заряда в плазме или металле с учётом экранирования ионами в плазме или из-за перераспределения зарядов в металле (см. вторую часть курса).

Простое вычисление интеграла (14.15b) даёт

$$f(q) = -\frac{2mg}{\hbar^2(q^2 + \mu^2)}. \quad (14.21)$$

Отсюда по общим формулам получается

$$d\sigma = \left| \frac{2mg}{\hbar^2(q^2 + \mu^2)} \right|^2 d\cos\theta d\phi \Rightarrow \sigma = \frac{4\pi(2mg)^2}{\hbar^4\mu^2(\mu^2 + 4k^2)}. \quad (14.22)$$

14.2.3. Формула Резерфорда

Для кулоновского поля $V = -Ze^2/r$ борновское приближение непосредственно неприменимо. Чтобы решить проблему, вспомним, что практически всегда хотя бы на очень больших расстояниях поле нашего кулоновского центра экранируется другими зарядами, т.е. начинает убывать с расстоянием значительно быстрее, и борновская теория начинает работать. Для имитации этого эффекта удобно использовать амплитуду (14.21), вычисленную для потенциала Юкавы (14.20).

Переход к пределу $\mu \rightarrow 0$ даёт искомую амплитуду рассеяния по кулоновскому центру. Получающееся дифференциальное сечение не зависит от направления сил (притяжение или отталкивание) и совпадает с классическим ответом

$$f(q) = \frac{2mZe^2}{\hbar^2q^2} \Rightarrow \frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{mZe^2}{2p^2 \sin^2(\theta/2)} \right)^2 \equiv \frac{Z^2e^4}{16E^2 \sin^4(\theta/2)}. \quad (14.23)$$

Зависимость от знака взаимодействия появляется только в релятивистской теории рассеяния тождественных частиц или частиц на античастицах при учёте возможных процессов аннигиляции.

Надёжность использованной процедуры обеспечена тем, что детали экранирования (т.е. способ стремления μ к 0) не существенны при описании дифференциального сечения рассеяния на фиксированный угол. При переходе к очень малым углам возникает зависимость от деталей экранирования, приводящая к формально бесконечному полному сечению при $\mu \rightarrow 0$.

Приведём справочных целях также результат точного решения уравнения Шредингера, взятый из [1] (при $\mu = 0$). Из-за того, что кулоновское взаимодействие убывает с расстоянием слишком медленно, в этом случае сходящаяся волна появляется не только из падающей, но и из рассеяния. В итоге взамен (14.2) при $r \rightarrow \infty$ следует писать ($a = \hbar^2/(mZe^2)$)

$$\psi = \left[1 - \frac{i}{a^2 k^2 (\vec{q}\vec{r})} \right] e^{i[kz + \ln(\vec{q}\vec{r})/(ka)]} + \frac{f(\theta)}{r} e^{i(kr - \ln(\vec{q}\vec{r})/(ka))}, \quad (14.24)$$

а амплитуда рассеяния имеет вид

$$f(\theta) = -\frac{1}{2k^2 a \sin^2(\theta/2)} \times \frac{\Gamma(1 + i/(ka))}{\Gamma(1 - i/(ka))}. \quad (14.25)$$

(Нередко в определение амплитуды включают зависящую от угла часть "расходящейся" волны).

Получающееся отсюда выражение для сечения совпадает с результатом борновского приближения (14.23). Сильному изменению подверглась в сравнении с этим приближением эта фаза волновой функции.

14.2.4. Атомный формфактор

При упругом рассеянии электронов на атоме последний можно рассматривать как источник потенциала $\varphi(\vec{r})$, создаваемого средним распределением зарядов в атоме $\rho(\vec{r}) = Ze\delta(\vec{r}) - en(\vec{r})$ ($V = e\varphi$). (Заметим, что распределение плотности зарядов в атоме, "наблюдаемое" электроном, меняется в зависимости от величины времени пролета электрона "через" атом – медленный электрон "видит" усредненное распределение плотности, а быстрый – мгновенные положения других электронов, т.е. представление о не зависящей от времени плотности распределения зарядов перестаёт быть корректным. При усреднении по ансамблю пролетевших в разное время электронов для первого борновского приближения эта зависимость исчезает, а уже для второго приближения это различие должно учитываться.)

Потенциал удовлетворяет уравнению Пуассона $\Delta\varphi = -4\pi\rho$. Построим его фурье-образ, т.е. умножим на $e^{i\vec{q}\vec{r}}$ и проинтегрируем по r . Тогда для фурье-гармоник получается соотношение $\varphi_{\vec{q}} = 4\pi\rho_{\vec{q}}/q^2$. Поэтому

$$f(\vec{q}) = -\frac{2me^2}{\hbar^2q^2}F(\vec{q}), \quad F(\vec{q}) = Z - \int d^3r e^{-i\vec{q}\vec{r}} n(\vec{r}). \quad (14.26)$$

Функцию $F(\vec{q})$ называют атомным формфактором.

◆ Рассмотрим асимптотики формфактора.

◇ При $qa \ll 1$ (малые углы) можно разложить экспоненту под интегралом (14.26) в ряд

$$F(q) = Z - \int d^3r n(r) [1 - i\vec{q}\vec{r} + i^2(\vec{q}\vec{r})^2/2 + \dots].$$

Первое слагаемое в ряду под интегралом даёт суммарный заряд электронов Z , и уничтожается с вкладом заряда ядра, второе слагаемое под интегралом обращается в нуль в силу сферической симметрии; по той же причине третий член имеет вид $-q^2\langle r^2 \rangle/6$, где $\langle r^2 \rangle = \int d^3r r^2 n(r)$. В итоге $F(\vec{q}) = (q^2/6)\langle r^2 \rangle$. Отсюда получается $d\sigma/d\Omega = (\langle r^2 \rangle/3a_B)^2$.

Таким образом, при рассеянии на атоме полное сечение конечно.

◇ При $qa \gg 1$, т.е. при $\theta \gg (1/ka)$ быстро осциллирующий фактор под интегралом приводит к тому, что $|Z - F| \ll Z$, т.е. электрон "видит" только ядро. При этом сечение совпадает с Резерфордским.

□ *Пример:* рассеяние на атоме водорода в основном состоянии. Здесь $n(r) = |\psi_{100}(r)|^2$. Поэтому обозначая $u = (qa_B/2)^2$, имеем

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

□ Подобным же образом определяются формфакторы ядер и даже элементарных частиц, описывающие их внутреннюю структуру. В релятивистской задаче следует различать электрический и магнитный формфакторы. Измерения формфакторов на ускорителях послужили важным источником современных представлений о структуре частиц и ядер.

14.3. *Фазовая теория рассеяния

14.3.1. Парциальные амплитуды

В разд. 8.1 были найдены решения уравнения Шредингера (14.3) для состояний с определенными значениями энергии и момента импульса.

Это — произведения радиальных волновых функций $R_{k\ell}(r)$ на сферические гармоники $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ (8.2) с асимптотиками вида $\sin(kr - \ell\pi/2 + \delta_\ell)$. В нашем случае граничное условие имеет другой вид (14.2). Разложим решение задачи с этим граничным условием по решениям разд. 8.1 — по сферическим гармоникам. Такое разложение особенно удобно для медленных частиц, когда фактически работает только несколько первых гармоник (см. разд. 14.3.4). Область применимости такого описания часто простирается до довольно больших энергий. Это разложение оказывается также полезным при описании резонансов в рассеянии (разд. 14.3.6).

В нашем случае волновая функция зависит лишь от r и θ , но не от φ . Поэтому разложение этого решения по сферическим гармоникам (8.2) содержит лишь $Y_{\ell 0}(\theta, \varphi) \propto P_\ell(\cos \theta)$:

$$\psi(\vec{r}) = \sum A_\ell P_\ell(\cos \theta) R_{k\ell}(r). \quad (14.27)$$

С другой стороны, это решение при больших r совпадает с (14.2). При этом амплитуда рассеяния не зависит от угла φ , т.е. амплитуду $f = f(E, \theta)$ можно разложить по полиномам Лежандра (не прибегая к присоединённым полиномам):

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) f_\ell(E) P_\ell(\cos \theta); \\ f_\ell(E) &= \frac{1}{2} \int_0^\pi \sin \theta d\theta P_\ell(\cos \theta) f(E, \theta). \end{aligned} \quad (14.28)$$

Величины $f_\ell(E)$ называются *парциальными амплитудами*.

В соответствии с (14.28) и (А.8), полное сечение упругого рассеяния $\sigma_{el} \equiv \sigma$ складывается из *парциальных сечений* σ_ℓ :

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega = \sum_{\ell=0} \sigma_\ell, \quad \sigma_\ell = 4\pi(2\ell + 1) |f_\ell|^2. \quad (14.29)$$

Подобным же образом определяются и парциальные сечения для разных каналов неупругого рассеяния (см. ниже).

□ Проиллюстрируем это понятие в классической механике для рассеяния на твёрдом шаре радиуса R . Здесь ρ — прицельный параметр и (при $\ell \gg 1$) момент импульса $\hbar\ell = p\rho = \hbar k\rho$. Отсюда прицельный параметр, отвечающий данному значению ℓ , есть $\rho_\ell = \ell/k$. Парциальное сечение $\sigma_{\ell(\text{кл})}$ определяется как площадь кольца между окружностями радиусов ρ_ℓ и $\rho_{\ell+1}$, т.е. классическое парциальное сечение

$$\sigma_{\ell(\text{кл})} = \pi(\rho_{\ell+1}^2 - \rho_\ell^2) = \frac{\pi(2\ell + 1)}{k^2} \quad (\ell \leq kR). \quad (14.30)$$

Имея экспериментальные данные по угловому распределению рассеянных частиц, можно найти отдельные парциальные сечения и относительные фазы амплитуд. Так, если в рассеянии представлены только s - и p - волны ($\ell = 0, 1$), то сечение имеет вид $d\sigma = (|f_0|^2 + 6\text{Re}(f_0^* f_1) \cos \theta + 9|f_1|^2 \cos^2 \theta) d\Omega$. Процедуру извлечения парциальных волн из дифференциальных сечений называют фазовым анализом.

■ При детальном анализе полезным является исследование **парциальных амплитуд в зависимости от энергии во всей комплексной плоскости её значений**. Приведём некоторые результаты.

◇ Парциальная амплитуда является аналитической функцией энергии во всей её комплексной плоскости с разрезом по действительной оси при $E \geq 0$ и возможными полюсами при $E < 0$. Физическое значение амплитуды отвечает верхнему берегу разреза. (*Следует из принципа причинности.*)

◇ Рассматривая в гл. 2 задачу о прямоугольной потенциальной яме, мы обнаружили связь между полюсами амплитуды рассеяния (2.23) и энергиями связанных состояний (2.20). Это – частный случай общей теоремы: *Вне положительной полуоси особенности парциальной амплитуды могут быть только плюсами при $E < 0$. Положения этих полюсов отвечают энергиям связанных состояний с данным значением момента импульса ℓ .*

◇ Аналитическое продолжение парциальной амплитуды под разрез (на второй Риманов лист) может иметь полюса в точках $E_i = M_i - i\Gamma_i/2$. При небольших значениях Γ_i эти полюса отвечают резонансам в рассеянии, разд. 14.3.6, или квазисвязанным состояниям – *виртуальным уровням разд. 2.6.1 или квазиуровням разд. 5.3.3* с данным значением момента импульса ℓ (M_i – его масса, Γ_i – ширина).

14.3.2. Фазы рассеяния.

■ **Разложение плоской волны.** Плоскую волну можно разложить по сходящимся и расходящимся волнам (8.2). В соответствии с (14.27), в ответ входят только сферические гармоники с $m = 0$. Далее, поскольку энергия в задаче фиксирована, то радиальные функции зависят от той же величины k . Таким образом, используя (8.9) можно записать

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) R_{k\ell}^s(r).$$

Коэффициенты C_ℓ определяются стандартным образом, с помощью интегрирования по углам выражения $P_n(\cos \theta)e^{ikz}$ или сравнением избранных членов степенного разложения в двух частях равенства (как это сделано, например, в учебнике [1]). Окончательно, получается

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (-i)^\ell (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) \left(\frac{r}{k}\right)^\ell \left(\frac{1}{r} \frac{d}{dr}\right)^\ell \frac{\sin kr}{kr}$$

$$\stackrel{(r \rightarrow \infty)}{\Rightarrow} \sum \frac{2\ell + 1}{2ikr} P_\ell(\cos \theta) (e^{ikr} - (-1)^\ell e^{-ikr}). \quad (14.31)$$

■ Фазы рассеяния.

В полной волновой функции сходящаяся волна (in) получается только из разложения (14.31), а вклад в расходящуюся (out) дают и падающая и рассеянная волны. В итоге при $r \rightarrow \infty$ можно записать, вводя новую величину S_ℓ :

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_{out} + \psi_{in} = \sum \frac{2\ell + 1}{2ikr} P_\ell(\cos \theta) (S_\ell e^{ikr} - (-1)^\ell e^{-ikr}). \quad (14.32)$$

Сравнивая с (14.2), (14.28), получаем

$$S_\ell = 1 + 2ikf_\ell. \quad (14.33)$$

С другой стороны, согласно (8.11) при $r \rightarrow \infty$ функция

$$R_{k\ell} \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \frac{e^{i(kr - \ell\pi/2 + \delta_\ell)} - e^{-i(kr - \ell\pi/2 + \delta_\ell)}}{2ir}.$$

Разложение на сходящуюся и расходящуюся волны можно согласовать с (14.15а), (14.17), если положить

$$A_\ell = \frac{1}{k} \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot (2\ell + 1) i^\ell e^{i\delta_\ell}.$$

При этом (ср. (14.29))

$$S_\ell = e^{2i\delta_\ell}, \quad f_\ell = \frac{S_\ell - 1}{2ik} \equiv \frac{e^{2i\delta_\ell} - 1}{2ik} = e^{i\delta_\ell} \cdot \frac{\sin \delta_\ell}{k}; \quad (14.34)$$

$$\sigma_{el} = \sum \sigma_{\ell(el)}, \quad \sigma_{\ell(el)} = \frac{\pi}{k^2} (2\ell + 1) |1 - S_\ell|^2. \quad (14.35)$$

Если рассеяние чисто упругое, то все фазы действительны, и

$$\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell. \quad (14.36)$$

Значения фаз получаются из решения уравнения Шредингера для одномерного радиального движения на полупрямой с известным эффективным потенциалом $V_{eff}(r) = V(r) + \hbar^2 \ell(\ell + 1)/2mr^2$.

14.3.3. Рассеяние при наличии неупругости

Ниже мы говорим о неупругих процессах, не рассматривая их детально.

Напомним, что парциальная амплитуда расходящейся волны отличается множителем $(-1)^{\ell+1}S_\ell$ от соответствующей амплитуды в сходящейся волне. Если поглощения нет, то в силу сохранения вероятности $|S_\ell| = 1$. Если есть поглощение, то $|S_\ell| < 1$, и величина $1 - |S_\ell|^2$ описывает уменьшение потока частиц в расходящейся (out) волне по сравнению со сходящейся (in). Действительно,

$$J_{in} = -\frac{\pi\hbar k}{m} \sum (2\ell + 1); \quad J_{out} = \frac{\pi\hbar k}{m} \sum (2\ell + 1)|S_\ell|^2.$$

Неупругое сечение – разность этих интегралов, делённая на падающий поток j_{inc} , а полное сечение $\sigma_{tot} = \sigma_{el} + \sigma_{in}$. Окончательно

$$\begin{aligned} \sigma_{el} &= \sum \sigma_{\ell(el)}, & \sigma_{\ell(el)} &= \frac{\pi}{k^2} (2\ell + 1) (|1 - S_\ell|^2); \\ \sigma_{in} &= \sum \sigma_{\ell(in)}, & \sigma_{\ell(in)} &= \frac{\pi}{k^2} (2\ell + 1) (1 - |S_\ell|^2); \\ \sigma_{tot} &= \sum \sigma_{\ell(tot)}, & \sigma_{\ell(tot)} &= \frac{2\pi}{k^2} (2\ell + 1) (1 - \text{Re}S_\ell). \end{aligned} \quad (14.37)$$

Итак, при $S_\ell = 1$ нет ни поглощения, ни рассеяния, при $|S_\ell| = 1$ есть только рассеяние и нет поглощения, при $S_\ell = 0$ поглощение и рассеяние одинаково сильны.

Соотношение (14.35) позволяет вычислить и $\text{Im}f_\ell(k) = (1 - \text{Re}S_\ell)/2k$. Сравнение с (14.37) даёт **новую форму оптической теоремы**

$$(2\ell + 1)\text{Im}f_\ell(k) = \frac{k}{4\pi} \sigma_{\ell(tot)}(k). \quad (14.38)$$

14.3.4. Упругое рассеяние медленных частиц

При $ka \ll 1$ прицельные параметры $\rho_\ell = \ell/k \gg a$ для $\ell \neq 0$, поэтому лишь s - волна ($\ell = 0$) может давать заметное рассеяние. Таким образом, дифференциальное сечение изотропно.

Если потенциал достаточно быстро убывает с расстоянием, то фазы рассеяния малы при $k \rightarrow 0$:

$$\delta_\ell \propto k^{2\ell+1} \Rightarrow f_\ell \propto k^{2\ell}. \quad (14.39a)$$

Напомним, что фаза рассеяния безразмерна. Единственный размерный фактор, присутствующий в задаче помимо k , – характерный размер поля a . Поэтому выписанные оценки уточняются следующим образом:

$$\delta_\ell \propto (ka)^{2\ell+1} \Rightarrow f_\ell \propto a(ka)^{2\ell}. \quad (14.39b)$$

Видно, что вклады высших гармоник в условиях задачи подавлены.

Покажем, что это свойство имеет место в случае, когда применимо еще и борновское приближение (с небольшими уточнениями приводимый вывод работает и в общем случае). Для этого подставим в (14.28) формулу (14.15b), где разложим $\sin qr$ в ряд, и воспользуемся тождеством $q^2 = 2k^2(1 - \cos \theta)$. Обозначив $\cos \theta = z$, получаем

$$f_\ell(k) = -\frac{2m}{\hbar^2} \int r^2 dr V(r) dc P_\ell(z) \sum_k \frac{(-2k^2 r^2 (1-z))^n}{(2n+1)!}. \quad (14.40)$$

Функции $P_\ell(z)$ – полиномы (Лежандра) по z степени ℓ , ортогональные друг другу на отрезке $(-1, 1)$. Это означает, что вклад в f_ℓ дают только те слагаемые ряда, номер которых $n \geq \ell$. При $k \rightarrow 0$ это означает, что $f_\ell \propto k^{2\ell}$, что подтверждает утверждение (14.39a).

Такое вычисление дает правильный ответ, если интеграл (14.40) сходится для всех n . Это справедливо для ядерных сил, убывающих на больших расстояниях по закону $e^{-(r/a)}/r$. Межатомные и межмолекулярные силы убывают обычно медленнее – по степенному закону $V \sim 1/r^\gamma$. Для таких потенциалов зависимость (14.39a) имеет место только при $\ell < (\gamma - 3)/2$. Для фаз с $\ell > (\gamma - 3)/2$ оценка того же интеграла дает зависимость $\delta_\ell \propto k^{\gamma-2}$.

Итак, при низких энергиях $f_\ell \propto k^{2\ell}$. В частности, при низких энергиях основной вклад дает s -волна, для которой $\delta_0 = ak$. Величина a называется *длиной рассеяния*. При этом в соответствии со сказанным в начале раздела

$$d\sigma = a^2 d\Omega, \quad \sigma = 4\pi a^2. \quad (14.41)$$

14.3.5. Рассеяние быстрых частиц на черном шаре.

В этом разделе мы обсуждаем предел $ka \gg 1$. В этом случае квазиклассическое приближение применимо для оценок. Момент импульса частицы, движущейся с прицельным параметром ρ , есть $L = p\rho \equiv \hbar k\rho$. Поэтому значения момента, участвующие в соударениях, $\ell \lesssim \ell_0 = ka$.

При $\ell \gg \ell_0$ частицы не сталкиваются с рассеивателем, соответствующие $S_\ell = 1$. Как это часто бывает, основной вклад дают значения $1 \ll \ell < \ell_0$.

Рассмотрим дифракционное рассеяние быстрых частиц на поглощающем (черном) шаре радиуса a . (*Пример:* рассеяние нейтронов с энергией 100 МэВ на тяжелом ядре радиуса $a \sim 10^{-12}$ см, при этом $ka \sim 10$.) Эта задача полностью аналогична дифракции плоской волны на черном шаре. При $\ell \gg \ell_0 = ka$ частицы не сталкиваются с шаром, соответствующие $S_\ell = 1$. При $\ell \ll \ell_0$ частицы полностью поглощаются, $S_\ell = 0$. Область $\ell \approx \ell_0$ не дает большого вклада в сечение. Таким образом, в хорошем приближении

$$\sigma_{el} = \sigma_{in} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\ell_0} (2\ell + 1) = \frac{\pi \ell_0^2}{k^2} = \pi a^2; \quad \sigma_{tot} = 2\pi a^2,$$

т.е. полное сечение вдвое больше классического (14.30).

Согласно (14.35) амплитуда упругого рассеяния

$$f(k, \theta) = \frac{i}{2k} \sum_{\ell=0}^{\ell_0} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta).$$

При больших ℓ можно заменить суммирование интегрированием (А.10). Тогда получается

$$f(k, \theta) \approx \frac{i}{k} \int_0^{\ell_0} \ell J_0(\ell\theta) d\ell = \frac{ia}{\theta} J_1(ka\theta).$$

Поэтому (с учетом (А.11))

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

Иными словами, сечение упругого рассеяния велико лишь в области малых углов $\theta \leq (1/ka)$.

Для классических частиц дифракция практически не наблюдаема. Так, при $m \sim 1$ г и $v \sim 1$ см/с углы дифракции на шаре радиуса $a \sim 1$ см – порядка $\theta \sim (\hbar/mva) \sim 10^{-27}$. Увидеть это рассеяние можно было бы лишь на расстояниях $a \sim \theta^{-1} \sim 10^{27}$ см (размер видимой Вселенной).

14.3.6. Резонансное рассеяние

Рассмотрим, как проявляются в рассеянии квазистационарные состояния, подобные изучавшимся в разд. 5.3.3. Ниже мы будем рассматривать амплитуду как функцию энергии частицы E .

Перепишем $R_{k\ell}(r) \sim \sin(kr - \pi\ell/2 + \delta_\ell)/r$ в виде

$$R_{k\ell}(r) \rightarrow \frac{C}{r} [a_\ell(E)e^{ikr} + a_\ell^*(E)e^{-ikr}]; \quad a_\ell(E) = -ie^{i(\delta_\ell - \pi\ell/2)}.$$

При этом в соответствии с (14.34) парциальная амплитуда есть

$$f_\ell(E) = \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_\ell} - 1) = \frac{1}{2ik} \left[\frac{a_\ell(E)}{a_\ell^*(E)} (-1)^\ell - 1 \right]. \quad (14.42)$$

Пусть в рассматриваемом поле $V(r)$ возможно квазистационарное состояние при $E = E_0 = E_r - i\Gamma/2$ и $\Gamma \ll E$. Тогда асимптотика $R_{k\ell}(r)$ при данной энергии должна содержать только расходящуюся волну³, т.е. должно быть $a_\ell^*(E_0) = 0$. Тогда простейшая аппроксимация вблизи резонанса имеет вид: $a_\ell^*(E) \approx \beta_\ell^*(E - E_0) \equiv \beta_\ell^*(E - E_r + i\Gamma/2)$.

Отсюда следует, что парциальная амплитуда имеет полюс при $E = E_0^* = E_r - i\Gamma/2$:

$$f_\ell(E) = \frac{1}{2ik} \left[e^{2i\delta_{\ell 0}} \frac{E - E_r - i\Gamma/2}{E - E_r + i\Gamma/2} - 1 \right], \quad \left(e^{2i\delta_{\ell 0}} = (-1)^\ell \frac{\beta_\ell}{\beta_\ell^*} \right). \quad (14.43)$$

При этом $\delta_\ell = \delta_{\ell 0} - \text{arctg}[\Gamma/2(E - E_r)]$, и $\delta_{\ell 0}$ – фаза рассеяния вдали от резонанса. При прохождении через резонанс фаза рассеяния изменяется на π . Обычно фаза $\delta_{\ell 0}$ невелика, и парциальное сечение имеет резонансную зависимость от энергии, при $\Gamma \ll E_r$

$$\sigma_\ell = \frac{\pi}{k^2} \frac{(2\ell + 1)\Gamma^2}{(E - E_r)^2 + \Gamma^2/4}$$

(Сравните с резонансной кривой для колебательного контура).

Форма кривой сильно меняется, если нерезонансная (медленно меняющаяся) фаза $\delta_{\ell 0}$ заметно отличается от нуля. В частности, если $\delta_{\ell 0} = \pi/2$, то сечение в точке резонанса обращается в нуль, и появляются два пика при $|E - E_r| = \Gamma/2$ (с провалом между ними).

³Именно такое условие использовалось в разд. 5.3.3 для определения ширины квазиуровня Γ в заданном поле.

Чтобы выяснить смысл величины β_ℓ , вернемся к нестационарной задаче, изучавшейся в разд. 5.3.3. При $E = E_r - i\Gamma/2$ радиальная волновая функция на больших расстояниях есть

$$R_{k\ell}(r) = \beta_\ell^*(-i\Gamma) \frac{e^{ikr}}{r}.$$

Если $R_{k\ell}(r)$ нормирована во внутренней области на единицу, то полный поток в расходящейся волне $v\Gamma^2|\beta_\ell|^2$ должен равняться вероятности распада Γ/\hbar . Отсюда

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

Соотношение (14.43) показывает, что резонансам в рассеянии отвечают полюса в нижней полуплоскости комплексной энергии. Можно показать, что при аналитическом продолжении $f_\ell(E)$ в область отрицательных энергий E связанным состояниям с энергией $E_n < 0$ соответствуют полюса амплитуды рассеяния при $E = E_n$ (ср. (2.23)). Это еще одно проявление "родства" связанных состояний и резонансов (квазиуровней).

14.4. Задачи

1. Получите в борновском приближении дифференциальное сечение рассеяния и указать критерий применимости для потенциалов
 - (а) $V(r) = (g/r)e^{-\mu r}$ (Юкава);
 - (б) Are^{-br} ;
 - (в) $V = \begin{cases} -U & \text{при } |r| < a, \\ 0 & \text{при } |r| > a \end{cases}$ (прямоугольная яма).
2. Вычислить сечение упругого рассеяния быстрых электронов атомом водорода в основном состоянии.
3. Быстрый электрон упруго рассеивается протоном, находящимся в основном состоянии в поле $U = m\omega^2 \vec{r}^2/2$. Вычислить дифференциальное сечение.
4. Для сферической потенциальной ямы (барьера) радиуса R найти сечение рассеяния
 - а) в борновском приближении;
 - б) для медленных частиц (включая и резонансное рассеяние – ср. Галицкий и др., задача 13.35).
5. Найти фазы рассеяния для рассеяния в поле $V(r) = a/r^2$ при $a > 0$.

6. Найти дифракционную картину, возникающую при упругом рассеянии электронов в газе двухатомных молекул. Расстояние между атомами в молекуле a . Принять, что потенциал, создаваемый каждым атомом, имеет вид $V(r) = (\lambda/r)e^{-r/r_0}$. Предполагается, что $\lambda \ll \hbar^2/ma^2$; молекулы ориентированы хаотично. Считая $a \approx 3r_0 \approx 3 \text{ \AA}$, оценить, при каких энергиях можно наблюдать эту картину. Рассмотреть случаи больших и малых переданных импульсов. Разобрать ту же задачу, не конкретизируя вид потенциала $V(r)$. Выяснить, как по угловой зависимости дифференциального сечения можно находить a .
7. Найти сечение рассеяния медленных частиц на потенциале $V(r) = -G\delta(r - a)$. Рассмотреть s - и p - волновые вклады.
8. Вычислить фазы для рассеяния в поле $U(r)$ в борновском приближении.
9. Вычислить в борновском приближении фазы рассеяния для потенциала $U(r) = U_0e^{-r^2/a^2}$.
10. Получите амплитуду рассеяния во втором борновском приближении.

Приложение А

П1. δ – функция

• **Определение.** Как известно, δ – функция – не обычная функция, а *обобщённая функция*, или *распределение*. Эта функция обращается в нуль при $x \neq 0$, она не определена при $x = 0$. На пространстве обычных гладких функций $g(x)$ изучаемая δ – функция задаётся правилом свёртки с любой из функций $g(x)$,

$$\int_a^b g(x)\delta(x) = \begin{cases} g(0) & \text{при } a < 0 < b, \\ 0 & \text{при } a, b > 0 \text{ или } a, b < 0. \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

• **δ – функция как предел последовательностей обычных функций.** Во многих задачах δ – функция возникает как предел последовательности обычных функций, например,

$$\delta_1(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2}, \quad \delta_2(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\pi} \varepsilon} e^{-x^2/\varepsilon^2}, \quad \delta_3(x) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sin^2 xt}{\pi x^2 t}. \quad (\text{A.2})$$

Все эти представления описывают одну и ту же δ – функцию, определённую равенством (A.1). Для функции $\delta_3(x)$, совпадающей с (13.24), это было показано в гл. 13. Для функции $\delta_1(x)$ это видно из цепочки равенств

$$\begin{aligned} \int g(x)\delta_1(x)dx &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \int_{-a}^b \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2} g(x) dx \stackrel{x=y\varepsilon}{=} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \int_{a/\varepsilon}^{b/\varepsilon} \frac{1}{y^2 + 1} g(y\varepsilon) dy \\ &= g(0) \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{y^2 + 1} = g(0). \end{aligned}$$

Предельный переход $\delta_1(x)$ описывает, в частности, как от описания нестабильной частицы перейти к случаю, когда эффекты нестабильности не важны, и частицу можно считать стабильной.

• δ – функция от сложного аргумента

Пусть $f(x) = 0$ при $x = x_0$. Тогда

$$\delta[f(x)] = \frac{1}{|f'(x_0)|} \delta(x - x_0). \quad (\text{A.3})$$

Действительно, рассмотрим $I = \int \varphi(x) \delta[f(x)] dx$. Вблизи $x = x_0$ имеем $f(x) = f'(x_0)(x - x_0)$. Подставим это выражение в интеграл. Тогда после замены $y = f'(x_0)(x - x_0)$ получим соотношение, подтверждающее (A.3):

$$I = \int \varphi\left(x_0 + \frac{y}{f'(x_0)}\right) \frac{\delta(y)}{f'(x_0)} dy = \frac{\varphi(x_0)}{|f'(x_0)|}.$$

П2. θ – функция

В дополнение к δ – функции полезно определить также функцию

$$\theta(x) = \int_{-\infty}^x \delta(x) dx = \begin{cases} 0 & \text{при } x < 0, \\ 1 & \text{при } x > 0. \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

Очевидно, что $d\theta(x)/dx = \delta(x)$.

П3. Γ – функция

Γ – функция определяется как интеграл

$$\Gamma(p) = a^p \int_0^{\infty} x^{p-1} e^{-ax} dx. \quad (\text{A.5})$$

Полезные для нас свойства Γ функции:

$$\begin{aligned} \Gamma(p+1) &= p\Gamma(p); \\ \Gamma(n+1) &= n! \quad n - \text{целое}; \\ \Gamma(1/2) &= \sqrt{\pi}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

П4. Свойства некоторых специальных функций

Перечислим некоторые свойства полиномов Лежандра $P_\ell(x)$ и функций Бесселя $J_n(x)$:

$$P_k(-x) = (-1)^k P_k(x), \quad (\text{A.7})$$

$$\frac{2\ell + 1}{2} \int_0^\pi P_\ell(\cos \theta) P_m(\cos \theta) \sin \theta d\theta = \delta_{\ell m}. \quad (\text{A.8})$$

$$\int_0^a x J(x) dx = a J_1(a), \quad (\text{A.9})$$

$$P_k(\cos \theta) \rightarrow J_0(k\theta) \quad \text{при } k \rightarrow \infty. \quad (\text{A.10})$$

$$J_n(x) \Rightarrow \begin{cases} (x/2)^n & \text{при } x \rightarrow 0; \\ \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \cos\left(x - \frac{\pi n}{2} - \frac{\pi}{4}\right) & \text{при } r \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (\text{A.11})$$